



Titre: Analyse thermodynamique avancée appliquée au design d'un
Title: procédé de fabrication de benzène

Auteur: Oumar Diallo
Author:

Date: 1997

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Diallo, O. (1997). Analyse thermodynamique avancée appliquée au design d'un
Citation: procédé de fabrication de benzène [Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de
Montréal]. PolyPublie. <https://publications.polymtl.ca/6713/>

 **Document en libre accès dans PolyPublie**
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/6713/>
PolyPublie URL:

**Directeurs de
recherche:**
Advisors:

Programme: Non spécifié
Program:

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ANALYSE THERMODYNAMIQUE AVANCÉE
APPLIQUÉE AU DESIGN
D'UN PROCÉDÉ DE FABRICATION DE BENZÈNE

OUMAR DIALLO
DÉPARTEMENT DE GÉNIE MÉCANIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(GÉNIE ÉNERGÉTIQUE)
DÉCEMBRE 1997

© Oumar Diallo, 1997



**National Library
of Canada**

**Acquisitions and
Bibliographic Services**

**395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada**

**Bibliothèque nationale
du Canada**

**Acquisitions et
services bibliographiques**

**395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada**

Your file Votre référence

Our file Notre référence

The author has granted a non-exclusive licence allowing the National Library of Canada to reproduce, loan, distribute or sell copies of this thesis in microform, paper or electronic formats.

The author retains ownership of the copyright in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque nationale du Canada de reproduire, prêter, distribuer ou vendre des copies de cette thèse sous la forme de microfiche/film, de reproduction sur papier ou sur format électronique.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur qui protège cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

0-612-33124-5

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé:

ANALYSE THERMODYNAMIQUE AVANCÉE
APPLIQUÉE AU DESIGN
D'UN PROCÉDÉ DE FABRICATION DE BENZÈNE

présenté par : DIALLO Oumar

en vue de l'obtention du diplôme de : Maîtrise es sciences appliquées

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

M. Alberto Teyssedou, Ph.D., président-rapporteur

M. Daniel Rozon, Ph.D., directeur de recherche

M. Mikhail Sorin, Ph.D., codirecteur de recherche

M. François McKenty, Ph.D., membre

DÉDICACE

À ma mère :

Qui nous a quittés si tôt, nous ne restons pas un instant sans penser à vous.
Par votre amour nous avons vécu heureux et réussi à braver des obstacles.

À mon père :

Pour votre soutien tout au long de mes études, pour m'avoir encouragé à poursuivre mes études. Pour votre soutien moral et votre présence constante auprès de nous, nous sommes très fiers de vous Papa.

À ma tante :

Merci pour votre gentillesse et vos conseils, nous vous sommes très reconnaissants.

À mes frères et soeurs :

J'ai passé deux années loin de vous, cela m'a paru très long. Mais j'ai toujours senti votre présence par vos encouragements constants.

À mes amis :

On dit que l'on ressent la présence de ses amis quand on est loin d'eux, je viens de le constater. Vous m'avez aidé à me sentir moins seul !

REMERCIEMENTS

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude à mon directeur et à mon codirecteur de recherche, monsieur Daniel ROZON, Ph.D., F.C.N.S et directeur de l'institut de génie nucléaire; monsieur Mikhail SORIN, Ph.D., chercheur scientifique au laboratoire de recherche en diversification énergétique(LRDE-CANMET).

Mes plus sincères remerciements s'adressent également au professeur Jean PARIS, Ph.D., responsable du département de génie papetier, d'avoir mis à ma disposition le simulateur *ASPEN PLUS*.

Qu'il me soit permis également de remercier les responsables du programme canadien de bourse de la francophonie, particulièrement madame Micheline ROBERGE conseillère pédagogique, pour le support financier et l'assistance qu'ils m'ont accordés tout au long de mes études.

Je m'en voudrais de terminer sans remercier monsieur Alberto TESSEYDOU, Ph.D., professeur à l'institut de génie nucléaire, pour les logiciels et les documents qu'il a bien voulu me prêter au cours de mes études.

Mes remerciements vont également à l'endroit de madame Céline LABELLE, secrétaire à l'institut de génie nucléaire, pour toutes les informations utiles au cours de mon cheminement.

Enfin mes remerciements s'adressent à tous mes camarades de l'institut de génie nucléaire, en particulier Siamak KAVEH pour les "hints" sur les logiciels et Peters TYE pour sa participation lors de la préparation de la soutenance et sa touche « EnglishTIQUE » sur l'abstract.

RÉSUMÉ

Dans ce travail, on se propose de développer une nouvelle approche pour la synthèse des procédés. Elle est formulée et appliquée pour la conception d'un procédé de fabrication de benzène. La nouvelle approche proposée procède par réduction d'une superstructure en utilisant l'analyse exergetique basée sur la méthode de redistribution des charges.

Une superstructure est un schéma d'écoulement regroupant plusieurs procédés unitaires redondant en compétition pour réaliser la même opération. Ainsi la superstructure contient plusieurs structures topologiques résultant de toutes les combinaisons possibles entre les procédés unitaires qu'elle contient.

Dans ce travail on utilise une superstructure dans laquelle on dénombre 12 structures topologiques concurrentes pour réaliser la synthèse du benzène. En un premier temps, on a déterminé les paramètres de fonctionnement des procédés unitaires en utilisant des méthodes heuristiques et en effectuant des simulations partielles. Ensuite afin de comparer les 12 structures topologiques sur la base du rendement exergetique et de comprendre aussi les causes de dégradation énergétique au niveau des différents procédés unitaires, on a développé une nouvelle superstructure dite à «procédés concurrents» qui est une transformation expansive de la superstructure initiale.

La superstructure à «procédés concurrents» permet de regrouper les 12 structures topologiques concurrentes sur un même schéma d'écoulement, elle permet ainsi de les étudier et de les comparer simultanément. Le passage de la superstructure initiale à la superstructure à «procédés concurrents» est effectué sur la base des trois principes suivants :

- 1) ajustement des débits de matières premières pour avoir des sorties identiques au niveau des alternatives équivalentes,

- 2) permettre le mélange des courants devant les procédés unitaires dont le rendement exergetique et les consommations d'exergie primaire et d'exergie transformée sont constants quelque soit la structure considérée, et
- 3) restitution des compositions chimiques à la sortie des procédés décrits dans (2) par des séparateurs fictifs.

Par la suite, on effectue une simulation de la superstructure à «procédés concurrents» à l'aide du logiciel *ASPEN PLUS*, on obtient ainsi les variables d'écoulements, chimiques et thermomécaniques. Ces variables permettent de calculer les paramètres thermodynamiques des procédés unitaires, ainsi chaque procédé est caractérisé par sa surface nette qui exprime son impact sur le rendement exergetique global de la structure topologique dans laquelle il est compris.

Afin de choisir la meilleure structure topologique parmi les 12, la superstructure à «procédés concurrents» est réduite successivement. La réduction est effectuée en construisant des blocs à l'intérieur desquels on élimine les procédés unitaires qui ont les plus faibles surfaces nettes. Un bloc est défini comme une surface de contrôle englobant des procédés unitaires en compétition ayant les mêmes paramètres chimiques et thermomécaniques à l'entrée et à la sortie. Également à chaque étape de la réduction, on a déterminé les causes de contre performance thermodynamiques des différents procédés unitaires. La réduction de la superstructure à «procédés concurrents» a nécessité les trois étapes suivantes :

- 1) pour la première réduction, les blocs sont constitués d'alternatives de procédés unitaires qui sont localement en compétition,
- 2) pour la deuxième réduction, les blocs sont constitués de procédés unitaires consécutifs qui constituent des ensembles localement en compétition,
- 3) enfin pour la dernière réduction, les blocs sont constitués par des procédés unitaires consécutifs appartenant à des groupes de sous procédés indépendants.

La réduction de la superstructure à «procédés concurrents» a permis d'accéder à la topologie optimale du point de vue du rendement exergetique. On accède ainsi à une structure incluant une membrane et un absorbeur. Par analyse des charges exergetiques au cours des réductions successives, on a pu améliorer le rendement exergetique de la structure optimale en redistribuant les charges exergetiques de la membrane sur l'absorbeur. La redistribution des charges s'est traduite par une relocalisation de l'absorbeur.

Le problème de la synthèse du benzène a également été résolu par «Douglas, 1985» et «Kocis et Grossman, 1988» en utilisant respectivement l'approche hiérarchique et l'approche mathématique. Le schéma d'écoulement obtenu par l'approche qu'on a proposée conduit à une réduction de la consommation de matière première et donne également le meilleur rendement exergetique.

La méthode de synthèse des procédés qu'on a développée dans ce travail permet :

- a) la considération de plusieurs possibilités tout en ayant le contrôle du design, et
- b) la génération de nouvelles alternatives topologiques qui n'étaient pas incluses dans la superstructure de base.

Cependant dans l'approche proposée, on ne tient pas compte du coût du capital lié aux différents procédés unitaires, ainsi il est nécessaire de vérifier le potentiel économique une fois le design terminé.

ABSTRACT

The purpose of this work is to propose a new approach for process synthesis. It is formulated and tested for the design of a chemical plant producing benzene. In general, this new approach uses thermodynamic concepts in particular exergy analysis based on the method of load redistribution.

Initially, we use a superstructure found in the literature including many structures composed of unitary processes for which a number of different pieces of equipment may be chosen. The functional parameters for each of them are determined using heuristic methods and partial simulations. Next three principles which allow the initial superstructure to be transformed into a new one are developed. This new structure called “concurrent processes” superstructure allows to study simultaneously all concurrent structures. The principles used for this transformation are :

- 1) adjustment of raw material flows in order to mix exit flows of concurrent equivalent unitary processes;
- 2) mixing the flows at the entry of the unitary processes which have constant efficiency and exergy consumption;
- 3) correct the flow separation at the exits for all processes involved in principle (2).

Using the software ASPEN PLUS, the “concurrent processes” superstructure can be simulated. Various flow variables, i.e, chemical, thermomechanical and thermodynamic can then be accessed and analyzed.

Using the results of the simulation and exergy method loads redistribution, a structural optimization can be carried out. The objective is to analyze the exergy loads of each unitary process and determine the best structure which has the highest exergy efficiency.

Each process is characterized by the expression of its net exergy efficiency surface that includes its efficiency, primary and transformed fraction of exergy consumed. For each process, the interaction with other processes and their effect in the global efficiency may be quantified. The net exergy efficiency surface allows the unitary processes or regrouped processes having the smallest net surface to be eliminated.

The superstructure is then reduced by using blocs. A bloc is composed by concurrent unitary processes characterized by the same chemical and thermomechanical conditions at the entry and also at the exit. We need three reduction steps, in each step blocs are defined, and inside each of them we eliminate unitary processes which have the lowest net exergy efficiency surface. The three steps are listed below :

- 1) for the first reduction, blocs are composed by unitary processes which are locally in competition;
- 2) for the second step, blocs are composed by consequent unitary processes. They form groups which are locally in competition.
- 3) at the last step, blocs are composed by unitary processes which belong to independent groups of sub processes.

The optimal structure obtained by reduction contains an absorber and a membrane. By analyzing their exergy loads, the exergy efficiency of the optimal structure is subsequently improved by relocating the absorber.

Finally the target heat loads for the hot and cold utilities for the heat exchanger network are determined.

We compare our results with those obtained for the same synthesis using mathematical and hierarchical approaches, our approach yields to the best exergy efficiency and the lowest raw material consumption.

The method proposed allows the integration of engineering decisions of the functional design parameters of a chemical plant to be carried out. It is also possible to detect the reason of the poor performance for those structures which has been eliminated.

One of the highlight of this method is the possibility of relocating a unitary process. This allows to generate new structures which were not includes in the initial superstructure.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACES	iv
REMERCIEMENTS.....	v
RÉSUMÉ.....	vi
ABSTRACT.....	ix
TABLE DES MATIÈRES.....	xii
LISTE DES FIGURES	xvii
LISTE DES TABLEAUX.....	xx
NOMENCLATURE.....	xxiii
LISTE DES ANNEXES.....	xxvii
LISTE DES PLANS.....	xxviii
INTRODUCTION.....	1

CHAPITRE 1

DESCRIPTION ET SPÉCIFICATIONS DU PROCÉDÉ

DE FABRICATION DE BENZÈNE	4
1.1 Caractéristiques des réactions	4
1.2 Spécifications du design.....	5
1.2.1 Matières premières.....	5
1.2.2 Paramètres de la réaction primaire.....	5
1.2.3 Spécifications de la production de benzène.....	6
1.2.4 Contraintes de fonctionnement	6

CHAPITRE 2

APPROCHES UTILISÉES POUR LA SYNTHÈSE DES PROCÉDÉS,

DESCRIPTION DE L'APPROCHE PROPOSÉE.....	7
2.1 Problèmes à résoudre pour la synthèse des procédés	7
2.2 Approches pour la synthèse des procédés.....	8

2.2.1 Modèle de l'oignon.....	8
2.2.2 Approche hiérarchique pour l'obtention d'une structure irréductible	9
2.2.3 Création et optimisation d'une superstructure réductible: approche mathématique.....	10
2.3 Utilisation de la thermodynamique pour la synthèse des procédés.....	11
2.3.1 Détermination des cibles	12
2.3.2 Optimisation paramétrique.....	12
2.3.3 Évaluation individuelle des procédés unitaires.....	12
2.3.4 Avantages.....	13
2.3.5 Inconvénients.....	13
2.4 Description de l'approche proposée.....	13
2.4.1 Description du simulateur ASPEN PLUS.....	14

CHAPITRE 3

ANALYSE EXERGÉTIQUE PAR LA MÉTHODE

DE REDISTRIBUTION DES CHARGES	15
3.1 Notion d'exergie: définition, bilan, composantes	15
3.1.1 Classification des formes d'énergie	15
3.1.2 Sens physique de l'exergie	16
3.2 Définition de l'exergie	16
3.3 Composantes de l'exergie.....	18
3.4 Utilisation du concept de l'exergie	19
3.4.1 Bilan d'exergie.....	20
3.4.2 Nouvelle formulation du rendement exergétique.....	21
3.4.3 Analyse exergétique par la méthode de redistribution des charges.....	22

CHAPITRE 4

PRÉSENTATION DE LA SUPERSTRUCTURE DE BASE, DÉTERMINATION DES DÉBITS DE MATIÈRES PREMIÈRES ET DES PARAMÈTRES DE FONCTIONNEMENT

DES PROCÉDÉS.....	25
4.1 Superstructure de base	25
4.2 Détermination des débits de matières premières.....	29
4.2.1 Hypothèses du bilan de matière initial	29
4.2.2 Équation de bilan de matière.....	30
4.2.3 Calcul des débits.....	32
4.2.4 Détermination de la conversion du toluène et de la teneur en hydrogène à la purge.....	33
4.2.5 Simulation du bilan de matière pour l'obtention des débits de matières premières exacts.....	35
4.3 Paramètres de fonctionnement des procédés unitaires.....	37
4.3.1 Membrane.....	38
4.3.2 Flash F1 (séparation des phases).....	39
4.3.3 Colonne de stabilisation	40
4.3.4 Colonne de séparation du benzène.....	42
4.3.5 Colonne de toluène.....	43
4.3.6 Flash de stabilisation F2.....	44
4.3.7 Flash de séparation du toluène F3	44
4.3.8 Colonne d'absorption.....	44
4.3.9 Équipements auxiliaires.....	45

CHAPITRE 5

CONSTRUCTION ET SIMULATION DE LA SUPERSTRUCTURE À «PROCÉDÉS CONCURRENTS».....

5.1 Graphes des alternatives des différents groupes de sous procédés....	46
--	----

5.2 Identification des structures topologiques	
incluses dans la superstructure.....	48
5.3 Construction de la superstructure à «procédés concurrents».....	49
5.3.1 Principes de construction de la superstructure	
à «procédés concurrents».....	49
5.3.1.1 Principe de base PB 1.....	50
5.3.1.2 Principe de base PB 2.....	59
5.3.1.3 Principe de base PB 3.....	63
5.4 Simulation de la superstructure à «procédés concurrents».....	65
5.4.1 Choix des modèles de procédés unitaires.....	66
5.4.2 Débits de matières premières.....	67

CHAPITRE 6

RÉDUCTION DE LA SUPERSTRUCTURE PAR LA MÉTHODE DE REDISTRIBUTION DES CHARGES, DÉTERMINATION DES UTILITÉS CHAUDS ET FROIDES POUR LE RÉSEAU D'ÉCHANGEURS DE CHALEUR

6.1 Première réduction : 12 structures topologiques en compétition, 5 blocs.....	69 70
6.1.1 Alternatives de procédés unitaires en compétition au niveau de chaque bloc pour la première réduction	71
6.1.2 Calcul des rendements exergetiques et des consommations d'exergie des procédés unitaires pour la première réduction.....	73
6.1.3 Analyse des charges exergetiques et élimination de procédés unitaires pour la première réduction.....	75
6.2 Graphe des alternatives restantes après la première réduction	80
6.3 Deuxième réduction : 3 structures topologiques en compétition, 1 bloc.....	81

6.3.1 Alternatives de procédés unitaires en compétition au niveau du bloc 6 pour la deuxième réduction	82
6.3.2 Calcul des rendements exergetiques et des consommations d'exergie des procédés unitaires pour la deuxième réduction et élimination des procédés unitaires les moins performants.....	83
6.3.3 Analyse des charges exergetiques pour la deuxième réduction	85
6.4 Graphe des alternatives restantes après la deuxième réduction.....	85
6.5 Troisième réduction : 2 structures topologiques en compétition, 1 bloc.....	86
6.5.1 Alternatives de procédés unitaires en compétition au niveau du bloc pour la troisième réduction.....	87
6.5.2 Simulation de la superstructure à «procédés concurrents» réduite après la première et la deuxième réduction.....	87
6.5.3 Calcul des rendements exergetiques et des consommations d'exergie des procédés unitaires pour la troisième réduction.....	88
6.5.4 Choix de la topologie finale.....	90
6.5.5 Analyse des charges pour la troisième réduction	90
6.6 Amélioration de la solution finale par relocalisation de l'absorbeur.....	90
6.6.1 Analyse des effets de la relocalisation de l'absorbeur sur le système de séparation.....	96
6.7 Simulation de la solution finale.....	97
6.8 Rendement exergetique de la solution finale.....	98
6.9 Détermination des cibles pour le réseau d'échangeurs de chaleur.....	98

CHAPITRE 7

ÉVALUATION DE L'APPROCHE PAR RAPPORT À L'APPROCHE HIÉRARCHIQUE ET L'APPROCHE MATHÉMATIQUE.....	102
7.1 Évaluation de l'approche par rapport à l'approche hiérarchique.....	103
7.2 Évaluation de l'approche par rapport à l'approche mathématique.....	104
7.3 Comparaison des résultats de la synthèse du benzène par les approches hiérarchique, mathématique et l'approche proposée.....	106
7.3.1 Comparaison des consommations de matières premières et des débits de rejets.....	106
7.3.2 Comparaison des consommations énergétiques et des rendements exergetiques.....	107
7.3.3 Comparaison des profits annuels.....	109
CONCLUSION.....	111
RÉFÉRENCES.....	113
ANNEXES.....	116

LISTE DES FIGURES

Figure 2.1 : Couches du modèle de l'oignon	8
Figure 3.1 : Bilan d'exergie autour d'un système.....	20
Figure 3.2 : Diagrammes des charges, redistribution des charges	24
Figure 4.1 : Principales opérations à réaliser pour la synthèse du benzène....	26
Figure 4.2 : Alternatives des procédés unitaires incluses dans la superstructure	27
Figure 4.3 : Schéma d'écoulement pour la simulation du bilan de matière, cas de base : purge et recyclage du benzène	36
Figure 4.4 : Principe de la séparation par membrane	38
Figure 5.1 : 4 alternatives du groupe 4 (purge et recyclage du gaz).....	47
Figure 5.2 : 4 alternatives du groupe 5 (séparation du liquide et recyclage du toluène).....	47
Figure 5.3 : 12 structures topologiques incluses dans la superstructure	48
Figure 5.4.a : Regroupement des alternatives (1) et (2) du groupe purge et recyclage du gaz	51
Figure 5.4.b : Regroupement des alternatives (3) et (4) du groupe purge et recyclage du gaz.....	52
Figure 5.5 : Regroupement des alternatives (1) et (2) du groupe séparation du liquide et recyclage du toluène.....	53
Figure 5.6.a : Topologie de la superstructure à procédés concurrents après l'application de PB 1 et regroupement des courant à la sortie du flash F1: branche sans recyclage de benzène.....	56
Figure 5.6.b : Topologie de la superstructure à procédés concurrents après l'application de PB 1 et regroupement des courant à la sortie du flash F1: branche avec recyclage de benzène.....	58
Figure 5.7 : Mélange des courants devant le flash F1.....	63
Figure 5.8 : Topologie de la superstructure à procédés concurrents après l'application de PB 2 et PB 3	65

Figure 6.1. 5 blocs de la première réduction	70
Figure 6.2.a: Diagramme des charges des alternatives	
B1-a (purge et recyclage du benzène) et	
B1-b (récupération de l'hydrogène et recyclage du benzène).....	76
Figure 6.2.b : Diagrammes des charges des alternatives B2-a	
(purge et récupération du benzène) et	
B2-b (récupération de l'hydrogène et récupération du benzène).....	77
Figure 6.3.a : Diagrammes des charges des alternatives	
B3-a (colonne de toluène) et B3-b (flash de toluène),	
sans utilisation de l'absorbeur et stabilisation par colonne	78
Figure 6.3.b : Diagrammes des charges des alternatives	
B4-a (colonne de toluène) et B4-b (flash de toluène),	
avec utilisation de l'absorbeur et stabilisation par colonne.....	79
Figure 6.3.c : Diagrammes des charges des alternatives	
B5-a (colonne de toluène) et B5-b (flash de toluène),	
avec utilisation de l'absorbeur et stabilisation par flash.....	80
Figure 6.4 : 3 structures topologiques restantes après la 1 ^{ère} réduction.....	81
Figure 6.5 : 1 bloc pour la 2eme réduction.....	82
Figure 6.6 : 2 structures topologiques restantes après la 2eme réduction.....	85
Figure 6.7 : 1 bloc pour la 3eme réduction.....	86
Figure 6.8 : Configuration de la membrane et de l'absorbeur dans la structure	
optimale.....	92
Figure 6.9 : Diagrammes des charges de la membrane et de l'absorbeur.....	94
Figure 6.10 : Redistribution des charges de la membrane sur l'absorbeur.....	95
Figure 6.11 : Nouvelle position de l'absorbeur.....	94
Figure 6.12 : Schéma d'écoulement de la solution finale	97
Figure 7.1 : Schéma d'écoulement obtenu avec l'approche hiérarchique	103
Figure 7.2 : Schéma d'écoulement obtenu avec l'approche mathématique	105

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1.1 : Spécifications des matières premières	5
Tableau 4.1 : Table stœchiométriques simplifiée de la réaction primaire.....	32
Tableau 4.2 : Table stœchiométriques simplifiée de la réaction secondaire.. .	32
Tableau 4.3 : Débits de matières premières déterminés à l'aide du bilan initial.	34
Tableau 4.4 : Résultats des bilans de matière	37
Tableau 4.5 : Paramètres de la membrane placer à la purge	38
Tableau 4.6 : Paramètres de fonctionnement du flash F1	40
Tableau 4.7 : Paramètres de fonctionnement du stabilisateur.....	41
Tableau 4.8 : Paramètres de fonctionnement de la colonne de benzène.....	42
Tableau 4.9 : Paramètres de fonctionnement de la colonne de toluène.....	43
Tableau 4.10 : Paramètres de fonctionnement de l'absorbeur.....	45
Tableau 5.1 : Compositions molaires à la sortie de la phase liquide du flash avec les alternatives (1) et (2) du groupe purge et recyclage du gaz	54
Tableau 5.2 : Compositions molaires à la sortie de la phase liquide du flash F1..	55
Tableau 5.3.a : Paramètres du rendement exergétique du flash F1 : recyclage du benzène.....	60
Tableau 5.3.b : Paramètres du rendement exergétique du flash F1 : récupération du benzène.....	60
Tableau 5.4 : Consommation d'exergie au niveau du flash en fonction des alternatives.....	62
Tableau 5.5 : Débits d'hydrogène frais alimentant les 4 alternatives de recyclage du gaz.....	67
Tableau 5.6 : Débits de toluène frais alimentant les alternatives combinant l'absorbeur.....	68

Tableau 5.7 : Débits de toluène frais alimentant les alternatives ne combinant pas l'absorbeur.....	68
Tableau 6.1 : Valeurs numériques du rendement exergetique des différents procédés unitaires en compétition pour la première réduction.....	73
Tableau 6.2.a : spécifications des paramètres exergetiques des procédés unitaires concurrents: consommations et fractions d'exergie primaire et transformée..	74
Tableau 6.2.b : Spécification des paramètres exergetiques des procédés unitaires concurrents : surfaces positives, négatives et nettes	75
Tableau 6.3 : Valeurs numériques du rendement exergetique des différents procédés unitaires pour la deuxième réduction	83
Tableau 6.4.a : Spécification des paramètres exergetiques des procédés unitaires concurrents : consommations et fractions d'exergie primaire et transformée pour la deuxième réduction.....	84
Tableau 6.4.b : Spécification des paramètres exergetiques des procédés unitaires concurrents : surface positive, négative et nette pour la deuxième réduction	84
Tableau 6.5 : Débits d'hydrogène frais pour la simulation de la superstructure à "procédés concurrents" réduite après la première et la deuxième réduction.....	88
Tableau 6.6 : Débits de toluène frais pour la simulation de la superstructure à "procédés concurrents" réduite après la première et la deuxième réduction.....	88
Tableau 6.7 : Valeurs numériques du rendement exergetique des différents procédés unitaires pour la troisième réduction.....	89
Tableau 6.8.a : Spécification des paramètres exergetiques des procédés unitaires	

concurrents : consommations et fractions d'exergie primaire et transformée pour la troisième réduction	89
Tableau 6.8.b : Spécification des paramètres exergetiques des procédés unitaires concurrents : surface positive, négative et nette pour la troisième réduction	90
Tableau 6.9 : Sommaires des consommations d'exergie du groupe purge et recyclage du gaz dans la structure optimale (récupération de l'hydrogène par la membrane et récupération du benzène par l'absorbeur).....	93
Tableau 6.10 : Rendements et consommations d'exergie de l'absorbeur et de la membrane.....	93
Tableau 6.11 : Composant du rendement exergetique de la solution finale.....	98
Tableau 6.12 : Caractéristiques thermiques des courants de matière.....	100
Tableau 7.1 : Débits de matières premières et de rejets pour les différentes solutions.....	107
Tableau 7.2 : Consommations énergétiques et rendements exergetiques pour les différentes solutions	108

NOMENCLATURE

LETTRES ROMAINES

A	débit molaire à l'alimentation d'un procédé unitaire
A1	alternative numéro 1
A _i	facteur d'absorption du composant i
an	une année
B _i	bloc i
B _p	consommation totale d'exergie primaire
B _t	consommation totale d'exergie transformée
B _z	benzène
C _{xP}	consommation d'exergie chimique primaire
C _{xT}	consommation d'exergie chimique transformée
D	perte d'exergie
DB	débit molaire de benzène
DG _o	débit molaire de gaz frais
DGP	débit molaire de gaz à la purge
D _j	débit molaire de j
DT	débit molaire de toluène
DT _o	débit molaire de toluène frais
D _{ph}	diphényl
E	exergie totale
E _{in}	exergie à l'entrée
E _{out}	exergie à la sortie
E _Q	exergie thermique totale
E _{PT} ^{tr}	exergie thermomécanique en transit
E _{th}	Exergie thermomécanique totale

E_{xi}	exergie chimique totale d'un composant dans un mélange
E_x^{tr}	exergie chimique en transit
ExM	exergie chimique d'un mélange
e_e	exergie thermomécanique massique à l'entrée
e_{ie}	exergie chimique molaire de i à la sortie
e_{is}	exergie chimique molaire de i à l'entrée
$e_{o,i}$	exergie chimique standard molaire
e_s	exergie thermomécanique massique à la sortie
ex	exergie chimique molaire
G	génération d'un composant chimique
H_j	enthalpie molaire du composant j à la sortie du réacteur
H_{j0}	enthalpie molaire du composant j à l'entrée du réacteur
h	enthalpie massique
h_o	enthalpie massique dans les conditions de l'environnement
K_i	constante d'équilibre du composant i
L	débit molaire de liquide
M	méthane
m	débits massique
N	nombre de moles
n_i	nombre de moles du composant i
n_i^{tr}	nombre de moles en transit
P	pression
P_e	pression à l'entrée
P_o	pression de l'environnement
P_s	pression à la sortie
Q	quantité de chaleur
QC	puissance frigorifique
QH	puissance calorifique

T	température ou toluène
T_o	température de l'environnement
R	constante des gaz parfaits ou taux de reflux
R_m	taux de reflux minimum
r_j	vitesse de réaction de j
S	sélectivité
S_{nette}	surface nette
s	entropie massique
s_o	entropie massique
T_c	toluène consommé
t	temps
V	volume de contrôle
X	conversion
x_i	composition molaire du composant i
Y_{H_2}	teneur en hydrogène du gaz frais
Y_{PH_2}	teneur en hydrogène du gaz de purge
W	travail

LETTRES GRECQUES

ΔH_R	enthalpie de réaction
γ	coefficient d'activité
λ_p	fraction d'exergie primaire
λ_t	fraction d'exergie transformée
η_e	rendement exergétique
Θ	rapport stœchiométrique

EXPOSANTS

min	minimum
tr	transit
v	volume de contrôle

INDICES

e	entrée
o	paramètres de l'environnement
s	sortie
i	composant chimique
p	primaire
t	transformée

SYMBOLE

Σ	sommation
\$	dollard

LISTE DES ANNEXES

Annexe 1	Exergies chimiques standards
Annexe 2	Schéma d'écoulement de la superstructure de base
Annexe 3	Variantes des schémas d'écoulement de la simulation du bilan de matière
Annexe 4	Résultats des simulations partielles des colonnes de distillation
Annexe 5	Résultats de la simulation partielle du flash de séparation du toluène
Annexe 6	Répartition des composants chimiques dans les modules SEP 2
Annexe 7	Schéma d'écoulement de la superstructure à "procédés concurrents"
Annexe 8	Spécifications des courants d'entrée, de sortie et des parcours de transit pour le calcul des rendements exergétiques
Annexe 9	Expressions algébriques des consommations d'exergie
Annexe 10	Schéma d'écoulement de la superstructure après la première et la deuxième réduction
Annexe 11	Fichier de résultats de la solution finale

LISTE DES PLANS¹

Plan 1 : Schéma d'écoulement de la superstructure de base

Plan 2 : Schéma d'écoulement de la superstructure à «procédés concurrents»

Plan 3 : Schéma d'écoulement de la superstructure à «procédés concurrents» après la première et la deuxième réduction

Plan 4 : Schéma d'écoulement de la solution finale

¹ Les plans sont disposés à la fin du document

INTRODUCTION

La synthèse des procédés a pour objet de réaliser la production industrielle d'une substance initialement synthétisée au laboratoire. Pour se faire, trois étapes interactives sont nécessaires : le choix des procédés unitaires, la détermination des paramètres de fonctionnement et l'élaboration du schéma d'écoulement.

La synthèse des procédés est l'objet de recherches approfondies impliquant plusieurs disciplines, l'objectif le plus courant est de satisfaire une demande de production donnée tout en minimisant les coûts ou maximiser les profits. Cependant si l'objectif d'une unité de fabrication est de faire des profits, il reste que certaines contraintes sous-jacentes ne peuvent être occultées, il s'agit notamment de la minimisation de la consommation énergétique globale, du respect des normes environnementales, de sécurité, etc.

Pour réaliser son design, l'ingénieur dispose de plusieurs solutions pour le choix des procédés unitaires, cependant il reste souvent à déterminer une structure optimale de même que des paramètres de fonctionnement adéquats. L'évolution de l'informatique apporte un outil nouveau, en effet il est possible de tester les éventuelles solutions retenues à l'aide d'un simulateur. Mais cet apport certes très efficace ne résout pas le problème en entier, il est nécessaire de le combiner avec d'autres méthodes. Plusieurs approches ont été proposées pour la synthèse des procédés, parmi lesquelles l'approche hiérarchique et mathématique, il existe également des approches basées sur la thermodynamique.

«Douglas, 1985,1988» propose une approche hiérarchique menant à l'élaboration d'une structure irréductible. Dans cette approche, les paramètres de fonctionnement des différents procédés unitaires ainsi que leurs choix sont fixés à l'aide de méthodes

heuristiques. Les méthodes heuristiques sont des solutions ou des techniques déjà éprouvées sur des cas réels. A chaque étape du design, le concepteur évalue le potentiel économique qui selon le cas détermine la pertinence de l'introduction d'un procédé unitaire.

La puissance de calcul des ordinateurs a permis de mettre au point une nouvelle méthode basée sur la modélisation mathématique «Edgard et Himmelblau, 1988; Papoulias, et Grossmann, 1983» pour ne citer que ceux-ci. Dans cette approche la conception est transcrite dans un modèle de programmation mathématique avec comme fonction objective la maximisation des profits ou la minimisation des coûts. Les différentes équations du modèle représentent les équations des procédés unitaires, les contraintes de fonctionnement et de production. La résolution fait souvent appelle à la technique M.I.N.L.P (Mixed Integer Non Linear Programing), qui comporte des variables discrètes et continues liées par des équations linéaires ou non linéaires «Duran et Gossmann, 1986»

La thermodynamique est souvent utilisée pour déterminer les limites de performance des procédés, elle sert aussi à déterminer les causes de contre performance. Son utilisation pour la synthèse des procédés est limitée par le fait qu'elle n'intègre pas de variables économiques, cependant une approche basée sur la thermodynamique est souvent proche de l'optimum économique «Grossman, 1985». Ce fait s'explique parce qu'elle permet la minimisation de la dégradation de l'énergie et des matières premières qui constituent des facteurs de production importants. Les méthodes thermodynamiques actuelles semblent être limitées par le fait qu'elles n'intègrent pas souvent le procédé dans sa globalité, mais cherchent plutôt à améliorer localement les procédés unitaires.

Dans ce travail, on se propose de développer une nouvelle approche de synthèse basée sur la thermodynamique utilisant la méthode d'analyse exergetique dans sa formulation proposée par «Brodyansky *et al.*, 1994» qui utilise la notion de redistribution des charges

exergétiques. Ainsi en partant d'une superstructure, tirée de la littérature, incluant plusieurs procédés redondants en compétition, on a développé trois principes permettant sa transformation en une superstructure dite à «procédés concurrents» qui tient compte des spécificités de chacune des structures topologiques qui y sont incluses. La superstructure à «procédés concurrents» permet de faire l'étude simultanée de toutes les structures en compétition. Le choix entre les procédés unitaires concurrents est basé sur la valeur de la surface nette qui permet d'évaluer l'efficacité de chaque procédé unitaire, son influence sur les autres procédés unitaires et son impact sur le rendement global du système.

On utilise pour ce travail le logiciel ASPEN PLUS qui permet d'effectuer une simulation complète de la superstructure à «procédés concurrents» et ainsi d'accéder aux paramètres d'écoulement, chimique, thermomécanique et thermodynamique.

Le travail est présenté en sept chapitres comme suit : le premier décrit les spécifications du procédé de fabrication du benzène; quelques approches utilisées en synthèse des procédés sont présentées dans le chapitre deux; l'approche exergétique basée sur la méthode de redistribution des charges est expliquée en détail dans le chapitre 3. Le chapitre quatre présente la superstructure de base obtenue de la littérature, on y traite également de la détermination des paramètres de fonctionnement des procédés unitaires ainsi que des débits de matières premières. Les chapitres cinq et six constituent l'ossature du travail, en effet on y développe les concepts de transformation de la superstructure et l'évaluation des procédés en compétition ainsi que la solution finale déterminée, enfin on y détermine les cibles en utilités chaude et froide du réseau d'échangeurs de chaleur. Pour finir, dans le chapitre sept on effectue une évaluation et une comparaison de l'approche testée par rapport à la méthode mathématique et à l'approche hiérarchique.

CHAPITRE 1

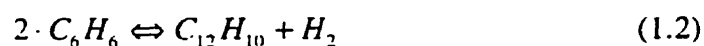
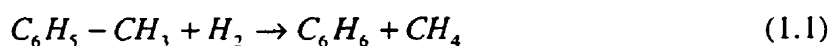
DESCRIPTION ET SPÉCIFICATIONS DU PROCÉDÉ DE FABRICATION DE BENZÈNE

Pour notre étude la formulation du problème est tirée du travail de «Douglas, 1988».

Le benzène est produit par réaction du toluène sur de l'hydrogène, une partie du benzène produit se transforme en diphényl par une réaction d'équilibre; le diphényl constitue un sous produit.

1.1 Caractéristiques des réactions

On a deux réactions en série décrites ci-contre :



$C_6H_5-CH_3$ = toluène

H_2 = hydrogène

C_6H_6 = benzène

CH_4 = méthane

$C_{12}H_{10}$ = diphényl

La réaction primaire est une hydrodésalkylation du toluène en benzène, le groupe méthyle est rompu et il est remplacé par un atome d'hydrogène, on obtient ainsi du benzène. Le second atome d'hydrogène se lie au méthyle libre pour former du méthane. La réaction est exothermique et on n'utilise pas de catalyseur.

La seconde réaction est une réaction d'équilibre. Le benzène par déshydrogénation se transforme en diphényl, ce dernier peut se combiner avec l'hydrogène pour reformer du benzène.

1.2 Spécification du design

1.2.1 Matières premières

Les matières premières sont constituées de toluène en phase liquide et d'un mélange gazeux composé d'hydrogène et de méthane. Le méthane est considéré comme une impureté et il est inerte dans le réacteur. Le tableau 3.1 indique les compositions ainsi que les pressions et températures des courants de matières premières.

Tableau 1.1 : Spécification des matières premières

Matières premières	Composition molaire	Température (°C)	Pression (bar)
Toluène	100 %	25	1,013
Mélange de gaz	H ₂ : 95 % CH ₄ : 5 %	38	38

1.2.2 Paramètres de la réaction primaire

La température à l'entrée du réacteur est fixée à 621,11 °C, la pression est de 34,47 bars. La sélectivité (S) est définie dans ce contexte comme le rapport entre le nombre de moles de benzène formées sur le nombre de moles de toluène qui ont réagi. Elle est obtenue de façon expérimentale «Douglas, 1988», elle est exprimée par la corrélation suivante :

$$S = 1 - \frac{0,0036}{(1 - X)^{1,544}} \quad \text{pour } X < 0,97 . \quad (1.3)$$

On désigne par X le taux de conversion, qui est défini comme le rapport entre le nombre de moles de toluène qui ont réagi sur le nombre de moles de toluène disponibles à l'entrée du réacteur.

1.2.3 Spécification de la production de benzène

La production de benzène désirée est de 265 kmol / hr avec une pureté de 99,97 %.

1.2.4 Contraintes de fonctionnement

Les contraintes suivantes doivent être respectées :

- a) Le rapport du nombre de moles d'hydrogène sur la somme des quantités molaires des aromatiques (benzène, diphenyl, toluène) à l'entrée du réacteur doit être supérieur ou égal à 5 pour éviter la cokéfaction, et
- b) la température à la sortie du réacteur doit être ramenée à 704°C pour éviter des réactions d'hydrocraquage.

Le problème ainsi formulé doit être résolu par la détermination d'un schéma d'écoulement incluant différents procédés unitaires (réacteurs, séparateurs, mélangeurs, équipements auxiliaires) qui doivent également être choisis. Pour chacun des ces procédés unitaires, on doit déterminer les paramètres de fonctionnement.

CHAPITRE 2

APPROCHES UTILISÉES POUR LA SYNTHÈSE DES PROCÉDÉS, DESCRIPTION DE L'APPROCHE PROPOSÉE

2.1 Problèmes à résoudre pour la synthèse des procédés

L'analyse des problèmes à résoudre pour la synthèse des procédés, ainsi que les différentes approches suggérées pour leur résolution ont été proposées par «Smith, 1995».

La synthèse des procédés nécessite les trois étapes suivantes : le choix des procédés unitaires, la détermination de leurs paramètres de fonctionnement et la détermination des interconnexions entre les procédés unitaires et les circuits des courants de matière qui conduit au schéma d'écoulement. À ce niveau deux questions fondamentales sont soulevées :

- 1) peut - on trouver toutes les structures possibles ?, et
- 2) peut - on comparer toutes les structures trouvées sur une base commune?.

Une fois qu'un procédé de base est déterminé, il est alors possible de l'améliorer en ajoutant, en éliminant des alternatives ou en modifiant les paramètres opératoires. On effectue ainsi une optimisation structurale ou paramétrique ou la combinaison des deux. Chaque solution trouvée peut être évaluée selon un des critères décrits ci-après ou en les combinant :

- a) performance économique,
- b) efficacité énergétique,
- c) minimisation des rejets,

- d) sécurité, et
- e) flexibilité.

2.2 Approches pour la synthèse des procédés

Pour résoudre les problèmes soulevés, plusieurs approches ont été proposées, on rappelle ici les plus utilisées pour la synthèse des procédés de génie chimique.

2.2.1 Modèle de l'oignon

Le modèle de l'oignon est un concept de design qui procède par séquence hiérarchique. Le réacteur chimique est choisi en premier, suivi du système de séparation, à la troisième couche on détermine le réseau d'échangeurs de chaleur, à la dernière couche on effectue le design des équipements de production des utilités (vapeur, électricité, etc.). La figure 2.1 montre les différentes couches du modèle de l'oignon.

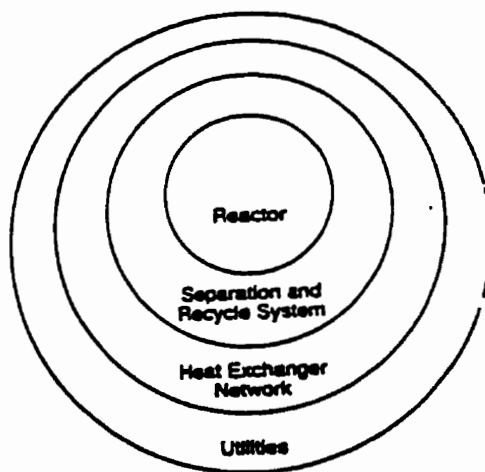


Figure 2.1: Couches du modèle de l'oignon (d'après Smith, 1995)

2.2.2 Approche hiérarchique pour l'obtention d'une structure irréductible

Cette approche a été introduite par «Douglas, 1985,1988»; elle est essentiellement basée sur le modèle de l'oignon.

Principe :

À chaque niveau de décision, des méthodes heuristiques sont utilisées pour choisir un procédé unitaire et la structure convenable entre le nouveau procédé introduit et le système existant. En l'absence de méthodes heuristiques, plusieurs alternatives sont générées, le choix final est validé par une analyse financière en évaluant le potentiel économique. À chaque étape on obtient ainsi une structure irréductible, d'après le travail de «Douglas, 1985» il a identifié 5 niveaux de décisions hiérarchiques :

- 1) choix du type de procédé (continu ou discontinu),
- 2) structure des entrées et sorties,
- 3) structure des courants de recyclage et choix des réacteurs,
- 4) système de séparation,
 - 4-1) système de séparation de la phase vapeur,
 - 4-2) système de séparation de la phase liquide,
- 5) conception du réseau d'échangeurs de chaleur et des procédés de production des utilités.

Avantages de l'approche hiérarchique :

Les avantages de cette approche sont :

- a) le concepteur peut contrôler les décisions essentielles à chaque étape, il peut ainsi y inclure les données intangibles, et
- b) il permet l'obtention rapide d'un design réaliste.

Inconvénients de l'approche hiérarchique

Les inconvénients de cette approche sont :

- a) elle ne permet pas de faire une analyse globale de tout le procédé par évaluation des interactions entre les différentes composantes, et
- b) les choix étant basés sur des méthodes heuristiques, ils peuvent être imprécis dans certains cas.

2.2.3 Création et optimisation d'une superstructure réductible : approche mathématique

Principe :

Une étape initiale précède l'optimisation, elle consiste en une étude qualitative de la morphologie du procédé afin de trouver toutes les structures logiques possibles. On obtient ainsi une superstructure regroupant un nombre fini de procédés unitaires redondants parmi lesquels sera choisi le procédé optimal. La seconde étape consiste en une transcription du design en formulation mathématique à l'aide de deux types de variables :

- 1) des variables continues qui définissent les paramètres de fonctionnement dans les modèles mathématiques des procédés unitaires et les variables de design (débits, composition, température, pression, taille des équipements, coûts et profits), et
- 2) des variables entières qui définissent la topologie de la superstructure. Ces variables sont en général binaires et peuvent alors prendre seulement deux valeurs 0 et 1 définissant l'existence (1) ou la non existence (0) du procédé unitaire ou d'une connexion.

L'optimisation de la structure et des paramètres du procédé impliquent ainsi la résolution d'un problème de programmation non linéaire en variables mixtes (M.I.N.L.P), «Papoulias et Grossmann, 1983 ; Kocis et Grossmann, 1988; Kocis et Grossmann, 1989».

Avantages de l'approche mathématique :

- a) l'approche est globale, ce qui est une condition nécessaire pour obtenir une conception optimale
- b) l'analyse produit une superstructure logique et assure que toutes les alternatives sont considérées,
- c) ce type d'analyse permet de tenir compte des données économiques, et
- d) il est possible d'obtenir une solution automatisée.

Inconvénients de l'approche mathématique :

- a) on ne peut accéder à la structure topologique optimale si elle n'est pas incluse dans la superstructure initiale,
- b) le «savoir-faire» de l'ingénieur n'est pas utilisé pour l'optimisation,
- c) les intangibles (sécurité, environnement , etc.) sont difficiles à inclure dans la formulation mathématique, et
- d) les difficultés liées à la formulation et à la résolution du problème mathématique, ce qui nécessite de puissants outils de calcul.

2.3 Utilisation de la thermodynamique pour la synthèse des procédés

«Grossmann, 1985» fait une analyse des approches utilisées pour la synthèse des procédés. Une synthèse basée sur la thermodynamique conduit à un design ayant un bon rendement exergétique, elle permet ainsi de minimiser la dégradation énergétique, des matières premières ainsi que la réduction des rejets.

Les applications les plus courantes de l'approche thermodynamique sont :

la détermination des cibles, l'optimisation paramétrique et l'évaluation individuelle d'alternatives en compétition.

2.3.1 Détermination des cibles

La détermination des cibles est surtout utilisée pour la conception des réseaux d'échangeurs de chaleur, la méthode d'analyse du pincement en est l'application la plus développée. Elle permet entre autre de prédire les quantités de chaleur et de puissance frigorifique minimales, la surface d'échange globale ainsi que le nombre d'échangeurs de chaleur. Cette approche sera discutée au chapitre 6.

2.3.2 Optimisation paramétrique

Cette approche suppose la connaissance d'un procédé de base qui nécessite l'optimisation des paramètres de fonctionnement. Elle est basée sur l'évaluation de l'efficacité ou des pertes exergétiques de chaque procédé unitaire, l'évaluation permet la localisation des zones les plus dégradantes et va ainsi définir un ordre de priorité pour les études à mener. On cherche par cette méthode à réduire les pertes exergétiques les plus élevées.

2.3.3 Évaluation individuelle des procédés unitaires

Une approche a été proposée par «Szargut, Morris et Steward, 1988» basée sur la détermination d'un coefficient nommé CE_xC (cumulative exergy consumption) défini comme égal à la somme des exergies des ressources naturelles consommées dans le procédé global. Ce coefficient donne une estimation quantitative de la consommation d'exergie de chaque alternative de procédés possibles pour une même production, il permet alors de faire une classification objective en se basant sur les CE_xC .

2.3.4 Avantages

Les approches par l'optimisation paramétrique et par évaluation individuelle des procédés unitaires présentent les avantages suivants :

- a) ces approches permettent de faire une comparaison sur une base objective de plusieurs alternatives qu'il faudra cependant étudier individuellement,
- b) elles permettent de déterminer des stratégies de réduction de la consommation en matière première et en combustible, et finalement
- c) dans le cadre de ces approches, le savoir faire de l'ingénieur est prise en compte dans le choix des procédés unitaires ainsi que des paramètres opératoires.

2.3.5 Inconvénients

Les approches par l'optimisation paramétrique et par évaluation individuelle des procédés unitaires présentent les inconvénients suivants :

- a) elles ne permettent pas d'étudier les interactions entre les différentes parties d'un procédé,
- b) la réduction des pertes sur une partie du procédé ne garantit pas nécessairement l'amélioration du rendement global,
- c) il est difficile d'étudier toutes les possibilités, et
- d) elles ne permettent pas de tenir compte du coût du capital dans l'évaluation des alternatives, cependant elles conduisent souvent à un design proche de l'optimum économique, « Grossmann, 1985 ».

2.4 Description de l'approche proposée

Dans ce travail, on propose une nouvelle approche basée sur l'analyse exergetique. Les différents aspects ciblés sont la considération de plusieurs alternatives simultanément,

l'évaluation de l'impact de chaque procédé unitaire sur le système en entier, et la prise en compte du savoir faire du concepteur.

On effectue une optimisation structurelle en se basant sur une superstructure incluant plusieurs procédés en compétition. Les différentes alternatives sont comparées en utilisant l'analyse exergetique basée sur la méthode de redistribution des charges, le procédé choisi est celui qui donne le meilleur rendement exergetique. Les paramètres opératoires sont constants, ils sont fixés en se basant sur des méthodes heuristiques et en effectuant des simulations partielles pour déterminer des conditions opératoires satisfaisantes. Pour effectuer une partie de ce travail, le simulateur *ASPEN PLUS* a été utilisé.

2.4.1 Description du simulateur *ASPEN PLUS*

Toutes les simulations sont effectuées en utilisant le logiciel «*ASPEN PLUS*». C'est un simulateur modulaire séquentiel qui contient des modèles de procédés unitaires ainsi qu'une base de données très étendue incluant les propriétés physiques et chimiques des matières. Il permet en outre d'accéder aux variables d'écoulement et thermodynamiques avec lesquelles on détermine l'exergie des courants de matière ainsi que les consommations d'exergie et les rendements des différents procédés. Les différentes expressions utilisées pour les calculs exergetiques sont exposées au chapitre 3.

CHAPITRE 3

ANALYSE EXERGÉTIQUE PAR LA MÉTHODE DE REDISTRIBUTION DES CHARGES

3.1 Notion d'exergie

Une explication détaillée du concept de l'exergie est disponible dans la littérature : (Brodyansky *et al.* 1994; Kotas, 1995; Szargut, Morris et Steward; 1988).

3.1.1 Classification des formes d'énergie :

L'énergie se manifeste sous plusieurs formes, chacune avec ses caractéristiques et ses qualités. La qualité est qualitativement synonyme de la capacité à provoquer des changements. Les différentes formes d'énergie peuvent être classées en deux catégories : les formes d'énergie dites ordonnées et les formes d'énergie dite désordonnées.

Les formes d'énergie ordonnées :

Elles sont de deux types, l'énergie potentielle et l'énergie cinétique. Ces formes d'énergie possèdent les caractéristiques suivantes :

- a) il est possible de passer d'un type à l'autre avec une conversion totale en opérant de façon réversible, et
- b) le transfert d'énergie ordonnée entre deux systèmes s'effectue uniquement par échange d'énergie travail,
- c) le transfert d'énergie ordonnée entre deux systèmes n'entraîne pas de variation d'entropie, de tels procédés peuvent alors être analysés uniquement à l'aide du premier principe de la thermodynamique, et

d) les paramètres de l'environnement ne sont pas considérés lors du transfert d'énergie ordonnée entre deux systèmes.

Les formes d'énergie désordonnées :

Il s'agit de toute forme d'énergie autre que les formes d'énergie cinétique et potentielle.

Parmi les formes d'énergie désordonnées on peut citer, l'énergie interne de la matière, l'énergie thermique, l'énergie chimique et l'énergie associée au mouvement de turbulence des fluides. Les formes d'énergie désordonnées possèdent les caractéristiques suivantes :

- a) pour avoir un maximum de conversion d'une forme d'énergie désordonnée en une forme ordonnée, il est nécessaire d'avoir un procédé entièrement réversible,
- b) la limite maximale d'une telle conversion dépend des paramètres thermodynamiques du procédé mais aussi de l'environnement,
- d) la conversion entraîne en général une variation d'entropie, et
- c) l'analyse des formes d'énergie désordonnées nécessite la considération de la deuxième loi de la thermodynamique.

3.1.2 Sens physique de l'exergie

Pour caractériser quantitativement la qualité des différentes formes d'énergie désordonnées, un standard universel de qualité doit être définie. Le travail maximal obtenu à partir d'une forme d'énergie en prenant comme référence les paramètres environnementaux est choisi comme standard et il est désigné sous le nom d'exergie.

3.2 Définition de l'exergie :

On définit l'exergie comme le travail maximal réversible que l'on peut tirer d'un courant de matière ou d'énergie lorsque celui-ci est porté à l'équilibre avec l'environnement pris comme état de référence.

L'état de référence :

Un principe de base pour la méthode d'analyse à travers le concept d'exergie est le fait que tous les calculs adoptent un état commun de référence par rapport auquel la substance du système perd sa capacité de produire encore du travail. Cet état de référence est généralement l'environnement, l'exergie de l'environnement est nulle.

L'environnement est caractérisé par le fait que ses paramètres restent constants durant les interactions avec le procédé analysé. Une seconde condition est que les composantes de l'environnement doivent être en équilibre thermodynamique. Pour plusieurs cas d'études, il est suffisant de caractériser l'environnement par trois paramètres que sont la température, la pression et la composition chimique.

Pour notre étude, l'atmosphère caractérise l'environnement, la température de référence est de 25 °C , la pression est égale à 1,013 bar.

3.3 Composantes de l'exergie

Pour un courant de matière on distingue plusieurs composantes de l'exergie, les plus significatives dans notre étude sont les composantes chimique, thermique et thermomécanique.

L'exergie chimique :

L'exergie chimique est caractérisée pour un courant de matière se trouvant dans les conditions de pression et de température de l'environnement (P_o et T_o). Elle est définie comme étant égale au travail maximal qu'on peut obtenir quand la substance en considération est amenée de l'état auquel se trouve l'environnement jusqu'à l'état actuel par des procédés supposant un transfert de chaleur et de matière seulement avec l'environnement.

Mathématiquement l'exergie chimique est exprimée par les équations ci dessous, respectivement pour une substance dans un mélange et pour l'exergie chimique totale d'un mélange de gaz parfaits ou d'une solution idéale:

$$E_{xi} = n_i(e_{oi} + RT_0 \ln x_i) \quad (3.3)$$

$$E_{xm} = \sum n_i(e_{oi} + RT_0 \ln x_i) \quad (3.4)$$

Pour une mélange de gaz réel, on a l'expression de l'équation ci-après,

$$E_{xm} = \sum n_i(e_{oi} + RT_0 \ln \gamma_i x_i) \quad (3.5)$$

e_o = exergie chimique molaire standard de la substance i ,

m = mélange,

n_i = nombre de moles de la substance i ,

R = constante des gaz parfaits,

T_o = température ambiante,

x_i = fraction molaire de la substance i ,

γ_i = coefficient d'activité de la substance i à la pression et à la température de l'ambiance.

On trouve les valeurs des exergie chimiques standards molaires dans plusieurs ouvrages, pour notre étude les valeurs sont tirées de «Kotas, 995», elles sont indiquées à l'annexe 1.

L'exergie thermique :

L'exergie thermique exprime la quantité de travail maximale réversible que l'on peut soutirer d'une source de chaleur se trouvant à une température T qui est ramenée à la température T_o de l'ambiance, elle est exprimée par :

$$E_Q = Q(1 - T/T_o) \quad (3.6)$$

E_Q = exergie thermique,

T = température de la source de chaleur,

T_o = température ambiante.

L'exergie thermomécanique ou exergie physique :

L'exergie thermomécanique est égale à la quantité de travail maximale réversible obtenue en faisant évoluer un courant de matière de son état initial à l'état de l'environnement par un procédé physique faisant intervenir seulement des interactions thermiques avec l'ambiance. Au cours de l'évolution, la composition chimique est constante. L'exergie thermomécanique est exprimée par :

$$E_{th} = \dot{m} * [(h-h_o) - T_o(s-s_o)] \quad (3.7)$$

\dot{m} = débit massique,

h, s = enthalpie et entropie massique du courant à P et T,

h_o, s_o = enthalpie et entropie massique du courant à P_o et T_o ,

P, T = température et pression du courant,

P_o, T_o = température et pression de l'environnement.

3.4 Utilisation du concept d'exergie

En utilisant le concept d'exergie, la thermodynamique est capable d'aboutir :

- a) à mettre en évidence le manque d'efficacité de certains procédés, les pertes dans les équipements ou dans les installations, et
- b) à établir des rendements qui tiennent compte des deux lois de la thermodynamique.

Les méthodes d'analyse utilisées sont : le bilan exergétique, la détermination des rendements et la méthode de redistribution des charges.

3.4.1 Bilan d'exergie

La comptabilité exergétique effectuée à l'aide du bilan permet de faire une évaluation quantitative de la dégradation énergétique, c'est à dire de calculer les conséquences des

irrégularités thermodynamiques. Le bilan d'exergie autour d'un système en régime permanent est illustré par la figure suivante :

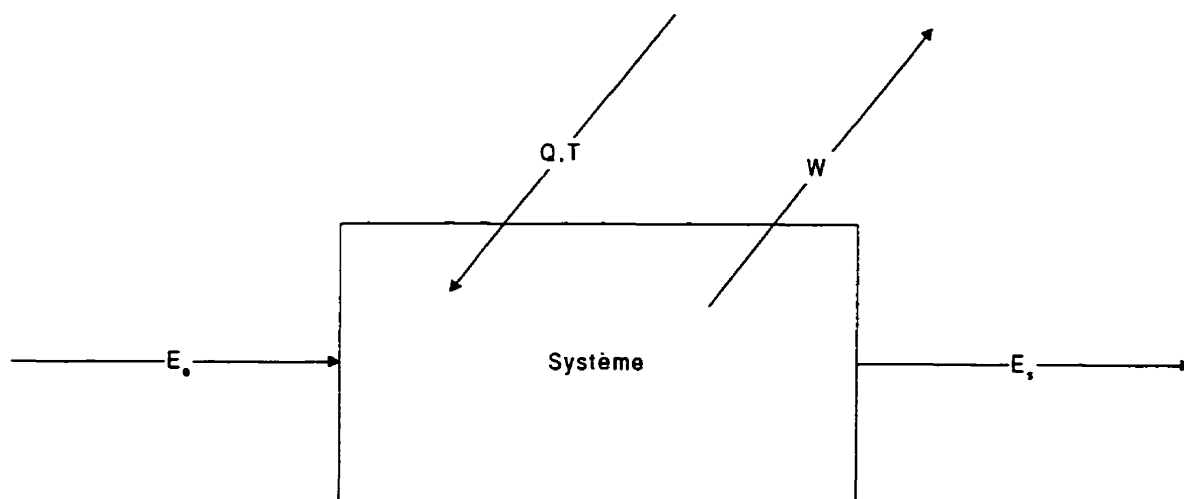


Figure 3.1 : Bilan d'exergie autour d'un système.

L'équation du bilan est exprimée par :

$$D = E_e + E_Q - W - E_s \quad (3.1)$$

$$E_Q = Q \left(1 - \frac{T_o}{T} \right) \quad (3.2)$$

D = perte d'exergie due aux irrégularités dans le système,

E_e = exergie du courant de matière à l'entrée du système,

E_s = exergie du courant de matière à la sortie du système,

E_Q = exergie de la quantité de chaleur fournie au système,

Q = quantité de chaleur fournie au système,

T = température à laquelle la quantité de chaleur est fournie,

T_o = température ambiante,

W = travail produit par le système.

3.4.2 Nouvelle formulation du rendement exergetique

La nouvelle formulation du rendement exergetique proposée par «Kostenko, 1983», puis par la suite développée par «Brodyansky *et al.*, 1994» et «Sorin *et al.*, 1994» permet de lier l'efficacité exergetique à l'utilisation pratique d'un procédé. En effet le rendement classique défini par l'équation ci-dessous reste incomplet pour certains cas.

$$\eta_e = \frac{E_{out}}{E_{in}} \quad (3.8)$$

E_{out} = exergie à la sortie,

E_{in} = exergie à l'entrée,

η_e = rendement exergetique

Considérons un réacteur chimique avec un taux de conversion du réactif de base nul, l'exergie à l'entrée est alors égale à l'exergie à la sortie. En utilisant l'équation (3.8), le rendement exergetique est alors égale à 1, certes les pertes d'exergie sont nulles, mais le réacteur ne produit rien!.

Pour résoudre ce problème la notion d'exergie en transit a été introduite. L'exergie en transit est définie comme une partie de l'exergie qui traverse le système sans être transformée ni transférée. Une méthode de calcul systématique a été développée par «Brodyansky *et al.*, 1994», pour évaluer l'exergie en transit pour toutes les formes d'exergie.

Exergie chimique en transit :

Elle est exprimée par l'équation suivante :

$$E_x^{\tau} = \sum_i n_i^{\tau} \cdot \min(e_{is}, e_{ie}) \quad (3.9)$$

E_x^{τ} = exergie chimique en transit du courant,

e_{is} = exergie chimique molaire de la substance i dans le mélange à la sortie du procédé,

$n_i^{tr} = \min(n_{ie}, n_{is})$, débit molaire du composant i en transit.

Exergie thermomécanique en transit :

Elle est exprimée par l'équation ci dessous,

$$E^{tr}_{PT} = \dot{m} \cdot \min[e_e(P_e, T^{min}); e_e(P_s, T^{min}); e_s(P_e, T^{min}); e_s(P_s, T^{min})] \quad (3.10)$$

E^{tr}_{PT} = exergie thermomécanique en transit,

e_e = exergie thermomécanique massique à l'entrée du système,

e_s = exergie thermomécanique massique à la sortie du système,

\dot{m} = masse en transit, la quantité de matière du courant qui transit entre l'entrée et la sortie,

P_e = pression à l'entrée et à la sortie du système,

P_s = pression à la sortie du système,

T^{min} = température minimale entre l'entrée et la sortie.

En utilisant la notion d'exergie en transit, l'expression du rendement devient alors :

$$\eta_e = \frac{E_s - E^{tr}}{E_e - E^{tr}} \quad (3.11)$$

Le numérateur indique l'effet utile net produit et le dénominateur la dépense nette. En recalculant le rendement exergetique du réacteur avec un taux de conversion du réactif de base très faible, le rendement exergetique est également proche de zéro.

3.4.3 Analyse exergetique par la méthode de redistribution des charges

La méthode de redistribution des charges a été proposée par «Sorin et Brodyansky, 1992», la nature de l'exergie consommée dans un procédé est classée en 2 catégories :

- 1) consommation d'exergie primaire, et
- 2) consommation d'exergie transformée.

L'exergie primaire est associée à l'exergie qui entre dans le système global, alors que l'exergie transformée est associée aux flux intermédiaires entre les procédés unitaires.

Ainsi pour chaque procédé unitaire on peut définir une charge exergetique qui est égale au rapport entre l'exergie consommée par le procédé en question sur l'exergie totale consommée par le système en entier. Cette charge est divisée en charge primaire et transformée, tenant ainsi compte des consommations d'exergie primaire et transformée. Avec ces notions une expression du rendement global a été proposée «Sorin et Brodyansky, 1992», elle est exprimée par l'équation suivante.

$$\eta_r = \sum_i [\eta_{e,i} \lambda_{p,i} - (1 - \eta_{e,i}) \lambda_{t,i}] \quad (3.12)$$

où

$\eta_r, \eta_{e,i}$ = rendement exergetique global du système et du procédé unitaire i,

$\lambda_{p,i}, \lambda_{t,i}$ = charges primaire et transformée du procédé i.

De cette expression découle les deux principes de la redistribution des charges nécessaires pour augmenter le rendement exergetique, ils sont formulés comme suit :

- a) augmenter les charges primaires sur les procédés ayant un rendement exergetique élevé, et
- b) réduire les charges transformées sur les procédés ayant un rendement exergetique faible.

L'expression $\eta_{e,i} \lambda_{p,i} - (1 - \eta_{e,i}) \lambda_{t,i}$ caractérise la contribution nette du procédé i sur le rendement global, l'augmentation du 1er terme (positif) entraîne un accroissement du rendement global croissant avec la valeur du rendement $\eta_{e,i}$. La diminution du 2eme terme (négatif), entraîne également un accroissement du rendement global décroissant avec la valeur du rendement. Une représentation graphique du rendement global est proposée comme illustrée par la figure suivante :

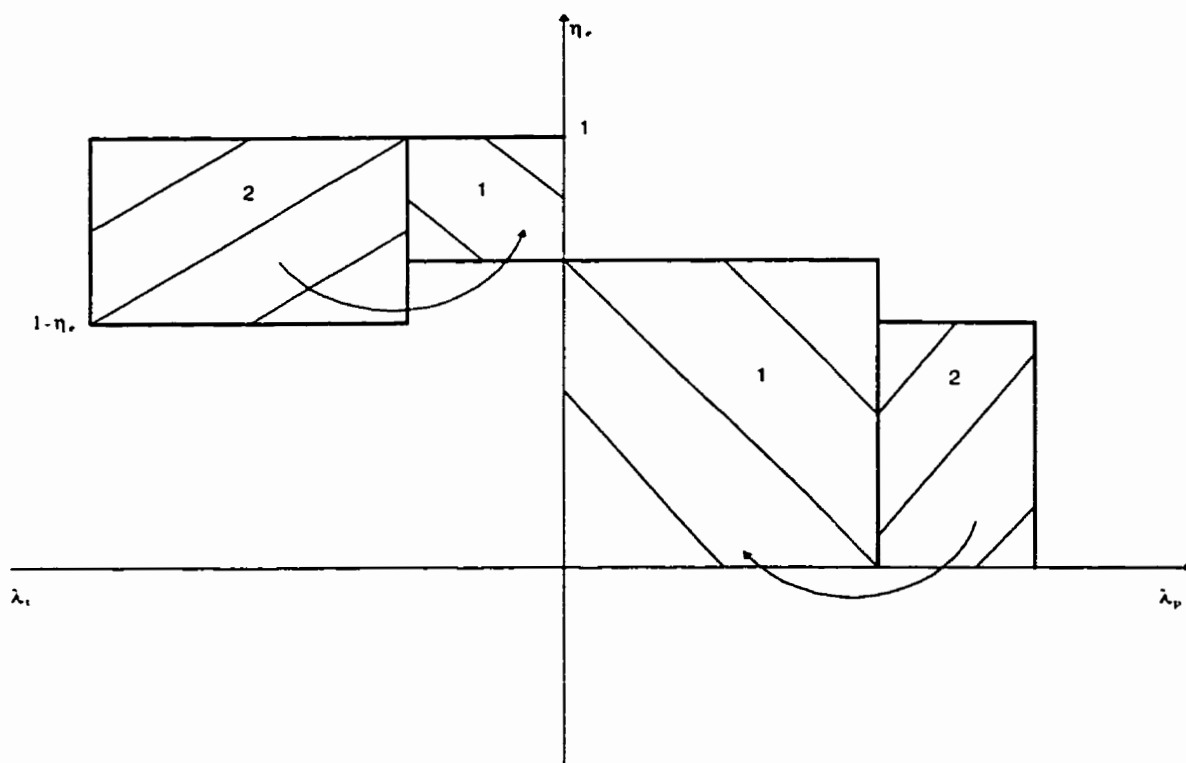


Figure 3.2 : Diagrammes des charges, redistribution des charges de 2 ans 1.

Dans ce système d'axes, les surfaces de droite expriment la relation $\eta_{ei}\lambda_{pi}$, et les surfaces de gauche la relation $(1-\eta_{ei})\lambda_{ti}$, le rendement global est alors la différence entre les totaux des deux groupes de surfaces.

On introduit ici la notion de surface nette d'un procédé i , qui exprime son impact sur le rendement global :

$$(S_{nette})_i = \eta_{ei}\lambda_{pi} - (1-\eta_{ei})\lambda_{ti} \quad (3.13)$$

Le rendement global est la somme des surfaces nettes des différents procédés unitaires.

CHAPITRE 4

PRÉSENTATION DE LA SUPERSTRUCTURE DE BASE, DÉTERMINATION DES DÉBITS DE MATIÈRES PREMIÈRES ET DES PARAMÈTRES DE FONCTIONNEMENT DES PROCÉDÉS UNITAIRES

Comme énoncé dans le paragraphe 2.4, l'approche qu'on propose est basée sur une superstructure. On rappelle également que l'optimisation est structurale, ceci suppose alors des paramètres opératoires fixes. Dans ce chapitre, on définit la superstructure considérée, également on détermine les débits de matières premières ainsi que les paramètres opératoires de chaque procédé unitaire inclus dans la superstructure.

4.1 Superstructure de base

Par définition la superstructure regroupe un nombre fini de structures de procédés, cela suppose qu'il y a une redondance des équipements pour réaliser les opérations unitaires. La présente superstructure est tirée du travail effectué par «Smith, 1995», qui a été proposée initialement par «Kocis et Grossman, 1988». On a modifié la superstructure proposée dans la littérature en éliminant une membrane utilisée pour éliminer les impuretés à l'entrée du système(méthane) et un réacteur isotherme comme alternatives.

Description des groupes de sous procédés :

Les différentes opérations à réaliser pour la synthèse du benzène peuvent être divisées en 5 groupes de sous procédés, comme suit :

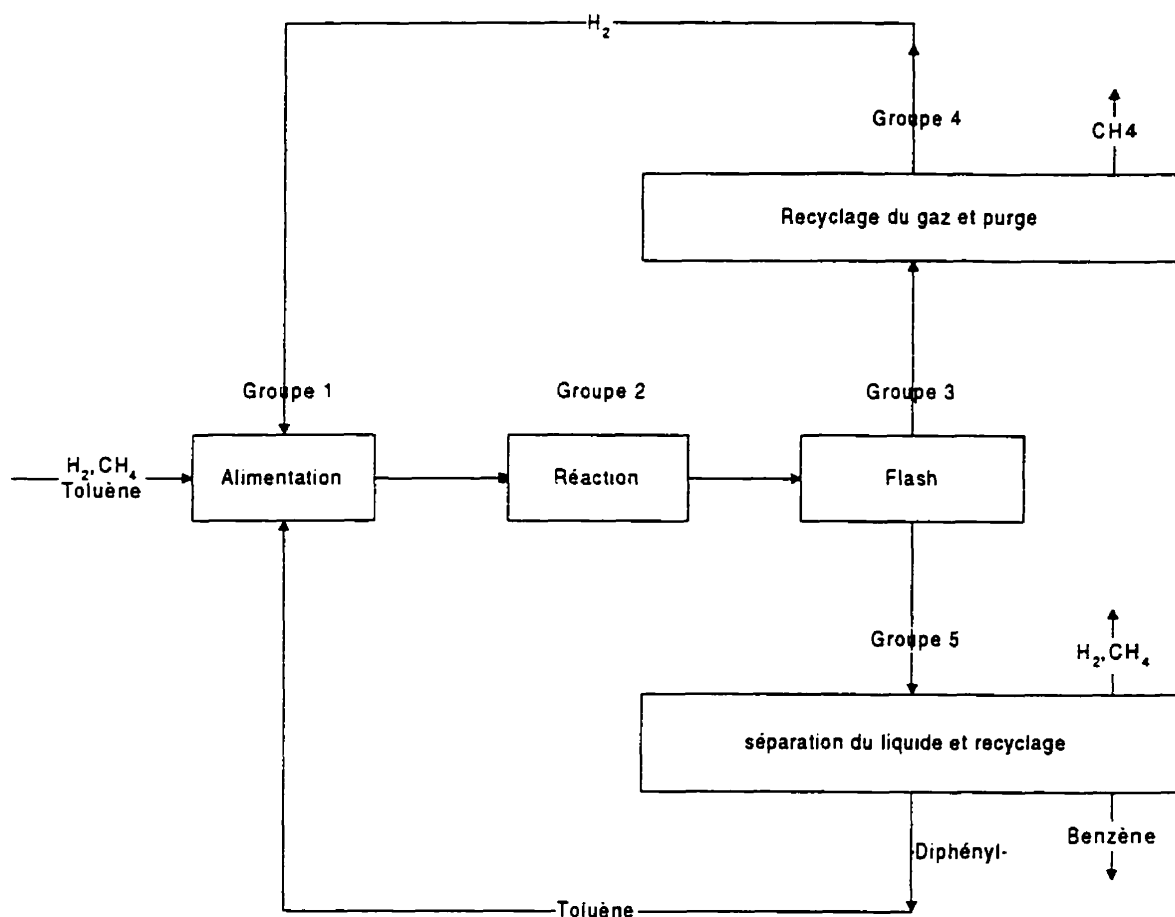


Figure 4.1 : Principales opérations à réaliser pour la synthèse du benzène.

- groupe 1 : l'alimentation en produits frais est composée de gaz (hydrogène, méthane) et de toluène en phase liquide, le méthane est une impureté,
- groupe 2 : préchauffage et réaction,
- groupe 3 : séparation des phases à la sortie du réacteur. La phase vapeur est principalement composée d'hydrogène et de méthane. La phase liquide est constituée principalement de benzène, toluène et diphényl,
- groupe 4 : purge et recyclage du gaz. Une partie du gaz est purgée pour éviter l'accumulation de méthane, le restant du gaz est recyclé vers le réacteur,

e) groupe 5 : séparation du liquide et recyclage du toluène. La séparation commence par une stabilisation pour éliminer les gaz dissous (H_2, CH_4) dans le liquide, ensuite on sépare le benzène, et enfin le diphényl est séparé du toluène, ce dernier est recyclé dans le réacteur.

Identification des alternatives dans les groupes de sous procédés :

Pour chaque groupe ainsi défini, il y a plusieurs procédés unitaires en compétition pour réaliser la même opération, comme illustré par la figure ci-dessous.

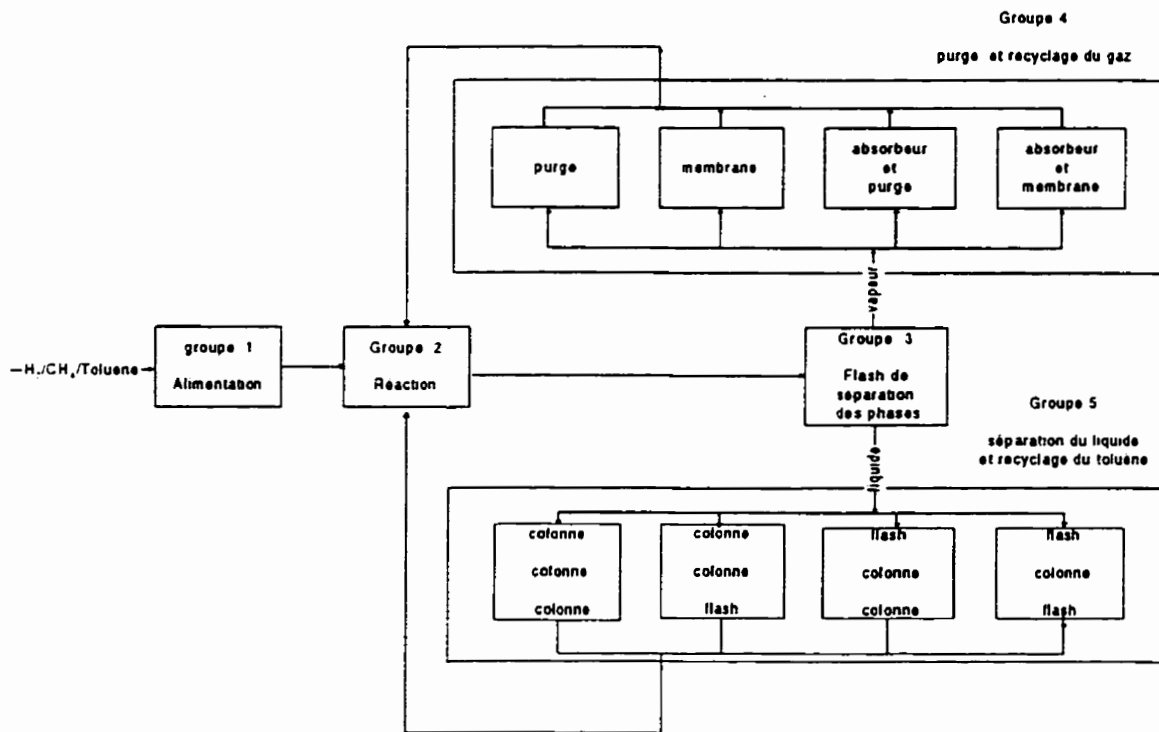


Figure 4.2 : Alternatives des procédés unitaires incluses dans la superstructure

- a) groupe 1 : l'alimentation en produit frais présente une seule alternative, les produits sont acheminés directement vers le système de réaction,
- b) groupe 2 : ici également on note une seule alternative, à savoir le préchauffage des

réactifs par un four et l'utilisation d'un réacteur adiabatique,

c) groupe 3 : la séparation des phases est effectuée par flash,

d) groupe 4 : le groupe purge et recyclage du gaz présente 4 alternatives.

d-1) on effectue une purge simple, une partie du gaz est rejetée, le restant est recyclé dans le réacteur,

d-2) utilisation d'une membrane qui est placée à la purge pour récupérer l'hydrogène. L'hydrogène récupéré est recyclé vers le réacteur,

d-3) une partie du gaz est purgée, le restant passe par un absorbeur dans lequel on récupère le benzène emporté dans la phase vapeur lors de la séparation par flash,

d-4) la dernière alternative dans ce groupe combine l'utilisation d'une membrane placée à la purge pour récupérer l'hydrogène et l'utilisation d'un absorbeur pour récupérer le benzène.

e) groupe 5 : 4 alternatives sont retenues pour le groupe séparation du liquide et recyclage du toluène.

e-1) l'élimination des gaz dissous est effectuée à l'aide d'une colonne de stabilisation, la séparation du benzène est effectuée par une colonne et enfin le toluène est séparé du diphényl à l'aide d'une colonne,

e-2) la deuxième alternative utilise une colonne comme stabilisateur, une colonne est également utilisée pour la séparation du benzène, la séparation du toluène est dans ce cas effectuée à l'aide d'un flash,

e-3) la stabilisation est effectuée par flash, le benzène est séparé à l'aide d'une colonne et enfin une colonne est utilisée pour séparer le toluène,

e-4) enfin la quatrième alternative utilise un flash pour la stabilisation, une colonne pour la séparation et un flash pour séparer le toluène du diphényl.

Le schéma d'écoulement incluant toutes les alternatives décrites ci-haut est présenté à l'annexe 2.

4.2 Détermination des débits de matières premières

On détermine dans cette partie, les quantités d'hydrogène et de toluène nécessaires pour produire la quantité de benzène spécifiée. En un premier temps, on détermine ces valeurs en utilisant des hypothèses simplificatrices, les valeurs obtenues seront utilisées pour initialiser la simulation du bilan de matière. En effectuant une simulation sur *ASPEN* dans laquelle on impose les contraintes et spécifications indiquées dans le paragraphe 1.2, on accède aux valeurs exactes des débits de matières premières.

4.2.1 Hypothèses du bilan de matière initial

Le bilan de matière initial est basé sur les hypothèses suivantes :

- 1) la réaction du diphényl sur l'hydrogène pour donner le benzène est négligée dans la deuxième réaction d'équilibre,
- 2) il n'y a pas de perte de matière, tout le toluène qui n'a pas réagi est recyclé, et
- 3) les procédés de séparation sont parfaits.

L'hypothèse (1) est justifiée par le fait que nous ne disposons pas des données cinétiques, en outre la vitesse de réaction inverse dans la réaction secondaire (équation 1.2) soit la transformation du diphényl en benzène est très faible «Douglas, 1988 ; Smith, 1995», cette réaction sera alors considérée comme irréversible. On considère alors seulement la transformation du benzène en diphényl et en hydrogène. Les hypothèses (2) et (3) sont des simplifications qui permettent d'avoir des valeurs très proches des débits molaires de matière première pour initialiser la simulation du bilan de matière.

4.2.2 Équation de bilan de matière

En considérant un procédé continu en régime permanent, le bilan de matière sur une espèce chimique j donnée est exprimé par l'équation suivante « Fogler, 1992 » :

$$D_{j_e} - D_j + \int_V r_j \cdot dV = \frac{dN_j}{dt} \quad (4.1)$$

$$\int_V r_j \cdot dV = G_j \quad (4.2)$$

D_{j_e} = débit molaire de la substance j à l'entrée du réacteur,

D_j = débit molaire de la substance j à la sortie du réacteur,

r_j = vitesse de formation ou de disparition molaire par unité de volume de la substance j .

V = volume du système considéré,

t = temps,

N_j = nombre de moles de la substance j à l'instant t ,

G_j = la génération ou la consommation de la substance j .

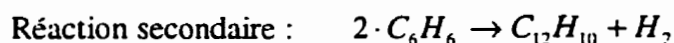
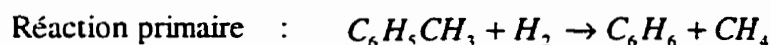
La quantité dN_j / dt représente la vitesse d'accumulation de l'espèce j , cette valeur est nulle en régime permanent. L'équation de bilan de matière devient alors :

$$D_{j_e} + G_j = D_j \quad (4.3).$$

En utilisant les définitions de la conversion, de la sélectivité (voir l'équation 1.3 et la section 1.2.2) et les relations stœchiométriques, nous pouvons déterminer les différents termes de l'équation du bilan de matière pour chaque composant.

Réactifs de base :

On réécrit les deux équations en série en tenant compte de l'hypothèse présentée dans la section 4.2.1.



Le toluène est le réactif de base dans la réaction primaire, la conversion et la sélectivité sont données par :

$$X = \frac{DT_o - DT}{DT_o} \quad (4.4)$$

$$S = \frac{DB}{X \cdot DT_o} \quad (4.5)$$

X = conversion du toluène,

S = sélectivité du toluène,

DT_o = débit de toluène frais,

DT = débit de toluène à la sortie du réacteur,

DB = débit de benzène désiré.

Les équations (4.4) et (4.5) donnent la consommation de toluène :

$$T_c = \frac{DB}{S} = X \cdot DT_o \quad (4.6)$$

T_c : toluène consommé.

Le benzène est le réactif de base dans la réaction secondaire. La quantité de benzène transformée est la différence entre la quantité formée dans la réaction primaire et la quantité nette. En utilisant les équations (4.5) et (4.6), on peut exprimer la quantité de benzène transformé :

$$B_t = \frac{DB}{S} - DB = (1 - S) \cdot X \cdot DT_o \quad (4.7)$$

B_t : débit de benzène transformé.

Tables stœchiométriques simplifiées :

Dans les tables stœchiométriques, on indique seulement les quantités de matière produites ou consommées.

Tableau 4.1 : Table stœchiométrique simplifiée de la réaction principale.

Espèces chimiques	Consommation Ou Production
Toluène ($C_6H_5CH_3$)	$- DB / S = - X \cdot DT_o$
Hydrogène (H_2)	$- DB / S$
Benzène (C_6H_6)	$+ DB / S$
Méthane (CH_4)	$+ DB / S$

Tableau 4.2 : Table stœchiométrique simplifiée de la réaction secondaire.

Espèces chimiques	Consommation Ou Production
Benzène (C_6H_6)	$- X \cdot DT_o \cdot (1-S)$
Hydrogène (H_2)	$+ X \cdot DT_o \cdot (1-S) / 2$
diphényl ($C_{12}H_{10}$)	$+ X \cdot DT_o \cdot (1-S) / 2$

4.2.3 Calcul des débits

Le bilan de matière sur l'hydrogène est donné par :

$$YH_2 \cdot DG_o - \frac{DB}{2} \cdot \left(\frac{1+S}{S} \right) = YPH_2 \cdot DGP \quad (4.8)$$

YH_2 = composition molaire en hydrogène du gaz frais,

DG_o = débit molaire du gaz à l'entrée du procédé,

YPH_2 = composition molaire en hydrogène du gaz de purge,

DGP = débit molaire du gaz de purge.

Le bilan de matière sur le méthane est donné par :

$$(1 - YH_2) \cdot DG_o + \frac{PB}{S} = (1 - YPH_2) \cdot DGP \quad (4.9)$$

Avec les équations (4.7) et (4.8) on obtient les débits de gaz frais et à la purge :

$$DG_o = \frac{DB \cdot \left[1 - (1 - YPH_2) \cdot \frac{1-S}{2} \right]}{S \cdot (YH_2 - YPH_2)} \quad (4.10)$$

$$DGP = DG_o + \left(\frac{PB}{S} \cdot \frac{1-S}{2} \right) \quad (4.11)$$

Les deux équations contiennent deux inconnues YH_2 et YPH_2 , en déterminant les valeurs de la conversion et de la teneur en hydrogène dans le gaz de purge, on peut accéder aux quantités de toluène et de gaz à l'entrée du procédé en utilisant la table stœchiométrique de la réaction primaire (équation 1.1) et l'équation (4.10).

4.2.4 Détermination de la conversion du toluène et de la teneur en hydrogène à la purge

Avec les valeurs des débits et l'équation d'énergie, on peut calculer la température à la sortie du réacteur adiabatique. On considère dans cette équation la valeur moyenne des chaleurs spécifiques à pression constante.

Équation d'énergie :

$$\dot{Q} - \dot{W} + D_{jo} \cdot \sum_j \Theta_j \cdot (H_{jo} - H_j) - DT_o \cdot X \cdot \Delta H_R(T) = 0 \quad (4.12)$$

$$\Theta_j = \frac{D_{jo}}{DT_o} \quad (4.13)$$

H_{jo} = enthalpie à l'entrée du réacteur,

H_j = enthalpie à la sortie du réacteur,

\dot{Q} = puissance thermique dégagée ou absorbée dans le réacteur,

\dot{W} = puissance mécanique du mélangeur,

T = température à la sortie du réacteur,

T_o = température à l'entrée du réacteur,

T_R = température de référence,

ΔH_R = chaleur de réaction à la température T .

Pour un réacteur adiabatique la valeur de Q est nulle, et en négligeant le travail mécanique ou pour un réacteur tubulaire, on obtient :

$$D_{jo} \cdot \sum_j \Theta_j \cdot (H_{jo} - H_j) - DT_o \cdot X \cdot \Delta H_R(T) = 0 \quad (4.14)$$

La détermination de la température à la sortie du réacteur a été résolue par «Douglas, 1988». Pour respecter la contrainte de température maximale à la sortie du réacteur (704 °C), les valeurs limites de la conversion et de la teneur en hydrogène à la purge sont : $X = 0,75$ et $YPH_2 = 60\%$. Avec ces valeurs on détermine les débits de matières premières, ces débits sont regroupés sur le tableau 4.3

Tableau 4.3 : Débits de matières premières déterminés à l'aide du bilan initial.

Désignation	Valeurs
Conversion du toluène	75 %
Conversion du benzène	3,1 %
Composition du gaz de purge en hydrogène	60 %
Débits molaires de toluène à l'entrée du procédé	273,36 kmol / Hr
Débits molaires de gaz à l'entrée du procédé	776,26 kmol / Hr

4.2.5 Simulation du bilan de matière pour l'obtention des débits de matières premières exacts

En effectuant le calcul simplifié des débits de matières premières, on a supposé une purge du gaz et le recyclage du benzène dans le réacteur. Cependant les alternatives identifiées dans le paragraphe 4.1 montrent que ces conditions peuvent varier, ainsi on effectue la correction des débits de matières premières en tenant compte de ces variations.

En analysant le procédé, on peut déterminer les paramètres qui peuvent influencer les débits de matières premières. Il s'agit de la composition du gaz recyclé suivant qu'il contient du benzène ou pas, ainsi que de la quantité d'hydrogène qu'il contient, selon qu'on le récupère par une membrane ou pas. Pour ce qui du liquide recyclé, la composition est constante, étant constitué uniquement par du toluène. Ainsi il existe 4 cas de base pour le bilan de matière :

- a) purge et recyclage du benzène,
- b) récupération de l'hydrogène et recyclage du benzène,
- c) purge et récupération du benzène, et
- d) récupération de l'hydrogène et du benzène.

Pour chaque cas de base, on effectue une simulation individuelle pour déterminer les valeurs des débits de matières premières.

Schémas d'écoulement :

Le schéma d'écoulement du cas de base avec une purge et recyclage du benzène est illustré par la figure 4.3. Les autres variantes du bilan de matière sont illustrées dans l'annexe 3. Les colonnes à distiller et les flashes sont modélisés par des séparateurs dans lesquelles on spécifie les fractions des composants à la sortie. Le tableau 4.4 résume les résultats des 4 simulations sur *ASPEN*.

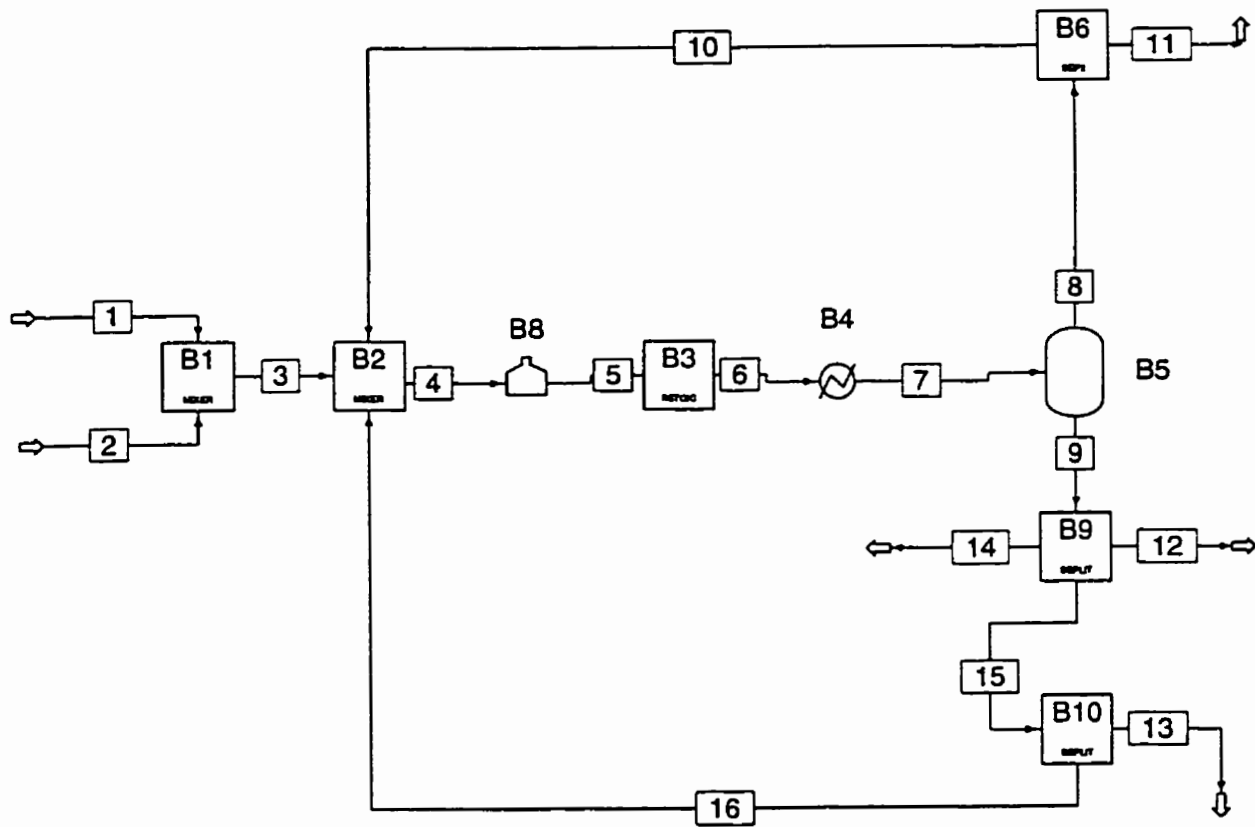


Figure 4.3 : Schéma d'écoulement pour la simulation du bilan de matière, cas de base : purge et recyclage du benzène.

Tableau 4.4 : Résultats des bilans de matière.

Débits molaires en kmol/hr	Bilan 1 : Purge et recyclage du benzène		Bilan 2 : récupération de H ₂ et recyclage du benzène		Bilan 3 : purge et récupération du benzène		Bilan 4 : Récupération du H ₂ et récupération du benzène.	
Gaz frais	H ₂	CH ₄	H ₂	CH ₄	H ₂	CH ₄	H ₂	CH ₄
	748,9	39,4	285	15	766,5	40,3	275,9	14,5
Toluène frais	279,496		279,524		279,37		279,043	
Benzène produit	264,999		264,98		265,013		264,99	
Gaz recyclé	1810,746		2275,46		1838,84		2232,68	
Toluène recyclé	91,23		91,23		91,02		91,03	
Rapport H ₂ /Aromatiques à l'entrée du réacteur	5,081		4,92		5,094		4,99	

4.3 Paramètres de fonctionnement des procédés unitaires

Pour chaque procédé unitaire inclus dans la superstructure, on détermine ses paramètres opératoires en se basant sur des méthodes heuristiques et en effectuant également des simulations.

4.3.1 Membrane

La membrane est placée à la purge et a pour fonction d'isoler l'hydrogène des autres composants (méthane, benzène, toluène et des traces de diphényl). La figure 4.4 est un schéma simplifié d'une membrane tirée de «Baker, *et al.*, 1991».

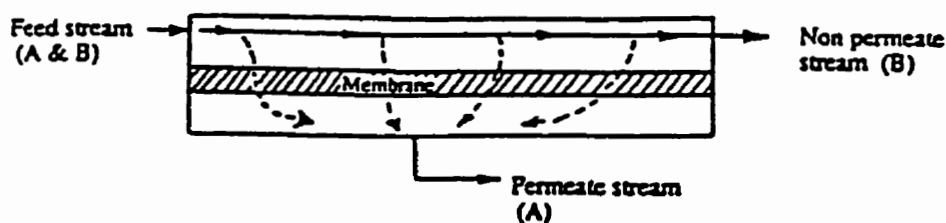


Figure 4.4 : Principe de la séparation par membrane, tiré de (Baker, *et al.*, 1991)

L'alimentation est constituée de gaz à haute pression, qui est soufflé à la surface de la membrane. La surface est constituée d'un matériau qui a une perméabilité sélective par rapport à un des constituants. Le passage du gaz sur la surface engendre une perte de charge élevée, elle est évaluée à près de 40 bars «Smith, 1995», il est nécessaire de placer des compresseurs à l'entrée et ou à la sortie de la membrane. Pour isoler l'hydrogène, on utilise souvent une membrane au palladium qui a une sélectivité infinie en théorie pour l'hydrogène «King, 1981». Le tableau 4.5 résume les paramètres de fonctionnement de la membrane.

Tableau 4.5 : Paramètres de la membrane placée à la purge.

Type	Palladium
Perte de charge	40 Bars
Entrée	H ₂ , CH ₄ , C ₆ H ₆ , C ₆ H ₅ -CH ₃ , C ₁₀ H ₁₂
Perméat	H ₂ (99%)
Retentat	CH ₄

4.3.2 Flash F1 (séparation des phases)

Il est utilisé pour séparer les composants à la sortie du réacteur en deux phases, vapeur (principalement hydrogène et méthane) et liquide (principalement benzène, diphenyl et toluène). Pour une séparation en une seule étape, comportant un courant d'alimentation et deux courants de sorties, un des groupes de paramètres suivants doit être spécifié «Henley et Seader, 1981» :

- a) la pression (P), et le rapport V/A ou L/A ,
- b) la pression (P), et la température : si le procédé est isotherme, et
- c) la pression (P) : si le procédé est adiabatique.

Avec :

A = débit molaire à l'alimentation,

V = débit molaire de vapeur,

L = débit molaire du liquide.

La superstructure suppose un flash adiabatique, on doit alors spécifier la pression, on devra également déterminer la valeur de la température à la sortie du condenseur. Elle est déterminée en se basant sur des méthodes heuristiques «Douglas, 1988», dans le cas où la sortie du réacteur est constitué de gaz, il est suggéré de le condenser jusqu'à $37,7\text{ }^{\circ}\text{C}$ ($100\text{ }^{\circ}\text{F}$). En fait, cette méthode heuristique suppose un refroidissement avec de l'eau comme caloporteur. La pression est fixée à 32,06 bar (465 psia) d'après «Douglas, 1988»; avec cette valeur de la pression, une partie du benzène se retrouve dans la phase vapeur.

On peut montrer qu'une augmentation de la pression entraîne une réduction de la constante d'équilibre qui est défini comme le rapport entre la fraction molaire dans la phase vapeur sur celle dans la phase liquide pour un composant donné. Cela entraîne une diminution de la perte de benzène dans la phase vapeur. Cependant la pression est limitée à 34,47 Bar (500 psia) qui correspond à celle du réacteur. Le tableau 4.6 résume les paramètres de fonctionnement du flash F1.

Tableau 4.6 : Paramètres de fonctionnement du flash F1

Type	Adiabatique
Température au condenseur	37,7 °C
Pression	32,06 Bar

4.3.3 Colonne de stabilisation

Elle est utilisée pour séparer les gaz dissous (hydrogène et méthane) provenant du flash F1. On doit définir les paramètres suivants : la répartition des composants chimiques, la pression d'opération, le taux de reflux (ou le nombre de plateaux). Le méthane est défini comme étant le composant léger, en imposant une récupération presque totale du méthane au distillat, l'hydrogène qui est plus volatil est également évacué. Le benzène est défini comme le composant lourd, ceci permet une récupération complète du toluène et du diphenyl qui sont plus lourds. On trouve dans «Henley et Seader, 1981» une discussion et un algorithme pour le choix de la pression des colonnes pour un design préliminaire. La pression de la colonne doit être choisie si possible inférieure ou égale à 28,6 bar (415 psia) avec une température au condenseur supérieure ou égale à 49 °C (120 °F), afin de permettre l'utilisation de l'eau comme caloporteur, ces critères sont basés sur des considération économiques. En effet le coût de la colonne est surtout influencé par la pression d'opération et la nature du réfrigérant utilisé au condenseur. La présence d'hydrogène et de méthane impose l'utilisation d'un condenseur partiel, dans ce cas la pression suggérée est comprise entre 14,82 bar (215 psia) et 25,16 bar (365 psia). Pour avoir un reflux suffisant, on doit laisser assez de benzène aller au condenseur. En fixant la composition au condenseur, nous pouvons déterminer la pression qui correspond à une température de condensation de 49 °C, cependant la quantité de benzène au condenseur n'est pas connue. Ainsi on fixe la pression à 17,23 bar (250 psia) avec une perte de charge de 0,34 bar (5 psia) entre le haut et le bas de la colonne. Par simulation partielle

de la colonne, en utilisant les débits calculés avec le bilan de matière, nous pourrions calculer la valeur de la fraction de benzène nécessaire au condenseur.

Le taux de reflux est déterminé à partir du reflux minimum (R_m) par une règle du pouce, cette règle est suggérée par «Douglas, 1988». En effet le taux de reflux, le nombre de plateaux et les puissances au rebouilleur et au condenseur sont liés. Un faible reflux entraîne l'utilisation d'un grand nombre de plateaux et une diminution de la puissance au condenseur et au rebouilleur. La valeur optimale est souvent comprise entre les limites suivantes : $1,03 < R/R_m < 1,3$, en pratique on choisit un taux de reflux égal à $1,2 \cdot R_m$. La valeur du reflux minimum ne dépend que de l'état de l'alimentation à la colonne et des spécifications de la séparation. Elle est déterminée à l'aide d'une simulation qui utilise également la même formule, les résultats sont indiqués dans l'annexe 4. Le tableau 4.7 résume les paramètres de fonctionnement de la colonne de stabilisation.

Tableau 4.7 : Paramètres du stabilisateur

Paramètres	Valeurs
Pression au sommet	17,23 bar
Pression en bas de colonne	17,57 bar
Reflux minimum	5,45
(Débit molaire au distillat / débit molaire de méthane à l'alimentation de la colonne) _{méthane}	0,999
(Débit molaire au distillat / débit molaire de méthane à l'alimentation de la colonne) _{benzène}	0,0012

4.3.4 Colonne de séparation du benzène

Elle est utilisée pour séparer le benzène du toluène et du diphényl. Le benzène est défini comme étant le composant léger, le toluène est défini comme le composant lourd. En tenant compte des spécifications, on doit avoir du benzène à 99,97 % au distillat. Ainsi, la fraction de benzène au distillat par rapport à l'alimentation sera très voisine de 1 et celle du toluène sera prise presque nulle. La pression de condensation du benzène à 49 °C est de 0,4 bar (5,8 psia) «Perry, *et al.* 1984 ». En se basant sur l'algorithme décrit plus haut, dans le cas où la pression est inférieure à 2,07 bar (30 psia), on la prend égale à cette valeur. On obtient la valeur du reflux minimum par simulation comme pour la colonne de stabilisation, les résultats sont indiqués dans l'annexe 4. Le tableau 4.8 résume les paramètres de fonctionnement de la colonne de benzène.

Tableau 4.8 : Paramètres de la colonne de benzène.

Paramètres	Valeurs
Pression au sommet	2,07 bar
Pression en bas de colonne	2,41 bar
Reflux minimum	1,3
(Débit molaire au distillat / débit molaire à l'alimentation de la colonne) $b_{\text{benzène}}$	0,999
(Débit molaire au distillat / débit molaire à l'alimentation de la colonne) $b_{\text{toluène}}$	0,00001

4.3.5 Colonne de toluène

Elle a pour fonction de séparer le toluène du diphényl. Le toluène est défini comme étant le composant léger avec un taux de récupération au distillat voisin de 1. Le diphényl est défini comme le composant lourd avec un taux voisin de 0. La pression de condensation du benzène à 52 °C est de 0,13 bar (1,93 psia) «Perry, *et al.* 1984 ».

La pression d'opération doit être ramenée à 2,07 bar (30 psia) comme spécifié dans l'algorithme cité plus haut. Cependant, le toluène recyclé est mélangé avec le toluène frais qui est à la pression atmosphérique. On fixe la pression de la colonne à 1,013 bar. On obtient la valeur du reflux minimum par simulation en procédant comme pour la colonne de stabilisation, les résultats sont indiqués dans l'annexe 4. Le tableau 4.9 résume les paramètres de fonctionnement de la colonne de toluène.

Tableau 4.9 : Paramètres de la colonne de toluène.

Paramètres	Valeurs
Pression au sommet	1,013 bar
Pression en bas de colonne	1,35 bar
Reflux minimum	0,0325
(Débit molaire au distillat / débit molaire à l'alimentation de la colonne) _{Toluène}	0,999
(Débit molaire au distillat / débit molaire à l'alimentation de la colonne) _{diphényl}	0,00001

4.3.6 Flash de stabilisation (F2)

Il remplit la même fonction que la colonne de stabilisation. Le procédé est adiabatique, il reste à définir la pression d'opération du ballon flash. La pression est égale à celle de la colonne de séparation de benzène, soit 2,07 bar comme indiqué dans la superstructure.

4.3.7 Flash de séparation du toluène (F3)

Il est utilisé pour séparer le toluène du diphenyl. L'alimentation est en phase liquide, au préalable, il faudra la réchauffer sous pression pour la vaporiser partiellement. En opérant le ballon flash à une pression de 1,013 bar, on entraîne beaucoup de toluène avec la phase liquide (74,5%). Pour une récupération totale du toluène, il faudrait une pression de 0,01 bar et dans ces conditions la température serait de -128, 3 °C. Ainsi pour avoir une bonne séparation on doit diminuer la pression tout en contrôlant la température. Pour déterminer les paramètres de fonctionnement on effectue une simulation partielle du flash F3 en combinant plusieurs valeurs de la pression avec la quantité de chaleur à ajouter dans le ballon flash (voir annexe 5). La chaleur fournie permettra de revaporiser une partie du toluène entraînée dans la phase liquide mais aussi d'obtenir une température suffisamment élevée. Avec une pression de 0,12 bar et une quantité de chaleur de 488 kW, on peut récupérer 97,35 % du toluène avec un faible recyclage du diphenyl (0,69 kmol / hr). Avec ces paramètres la température de sortie est de 75 °C.

4.3.8 Colonne d'absorption.

Elle est utilisée pour récupérer le benzène contenu dans la vapeur sortant des flashes F1 et F2; le solvant est du toluène frais. On doit spécifier la température, la pression et le débit du solvant. Une pression élevée et une faible température améliore l'efficacité de l'absorption, ainsi la pression est prise égale à la plus grande des pressions des courants

acheminés vers l'absorbeur , soit 32,06 bar (sortie du flash F1). Pour chaque composant , on définit le facteur d'absorption A_i .

$$A_i = \frac{L}{K_i \cdot V} \quad (4.16)$$

A_i = facteur d'absorption,

L, V = débit du solvant liquide et de vapeur,

K_i = constante d'équilibre.

Pour accroître le facteur d'absorption du benzène par le toluène, on peut accroître le débit du liquide ou augmenter le nombre de plateaux dans la colonne. La première solution entraîne des coûts de fonctionnement plus élevés alors que la seconde nécessite un investissement plus grand. La valeur optimale suggérée est comprise entre 1,2 et 2, la valeur utilisée en pratique est de 1,4 «Smith, 1995». Le débit de vapeur déterminé à partir du bilan de matière est de 1810,75 kmol/hr. La valeur de K_i dépend des conditions de températures et de pression, elle est de $8,83 \times 10^{-3}$.

Tableau 4.10 : Paramètres de fonctionnement de l'absorbeur.

Paramètres	Valeurs
Pression	32,06 bar
Débit du solvant	22,38 kmol/hr

4.3.9 Équipements auxiliaires

Les pressions de sortie des compresseurs et les températures de sortie des échangeurs de chaleur seront fixées pour satisfaire les spécifications des courants de matière concernés.

CHAPITRE 5

CONSTRUCTION ET SIMULATION DE LA SUPERSTRUCTURE À « PROCÉDÉS CONCURRENTS »

La superstructure présentée dans le chapitre 4 contient plusieurs structures de procédés en compétition. Dans ce chapitre, on détermine d'abord le nombre total de structures (schémas d'écoulement) inclus dans la superstructure de base, chacune d'entre elles étant une topologie possible pour la synthèse du benzène. Par la suite, on transforme progressivement la superstructure de base à l'aide de trois principes pour obtenir la superstructure à « procédés concurrents ». Le schéma d'écoulement de la superstructure à « procédés concurrents » est d'abord présenté schématiquement à l'aide d'un graphe. Ce dernier est ensuite transcrit à l'aide des modèles de procédés unitaires disponibles dans *ASPEN* pour en faire la simulation.

5.1 Graphes des alternatives des différents groupe de sous procédés

On rappelle les 4 alternatives du groupe purge et recyclage du gaz et les 4 alternatives du groupe séparation du liquide et recyclage du toluène. Elles sont illustrées par les graphes en arbre des figures 5.1 et 5.2.

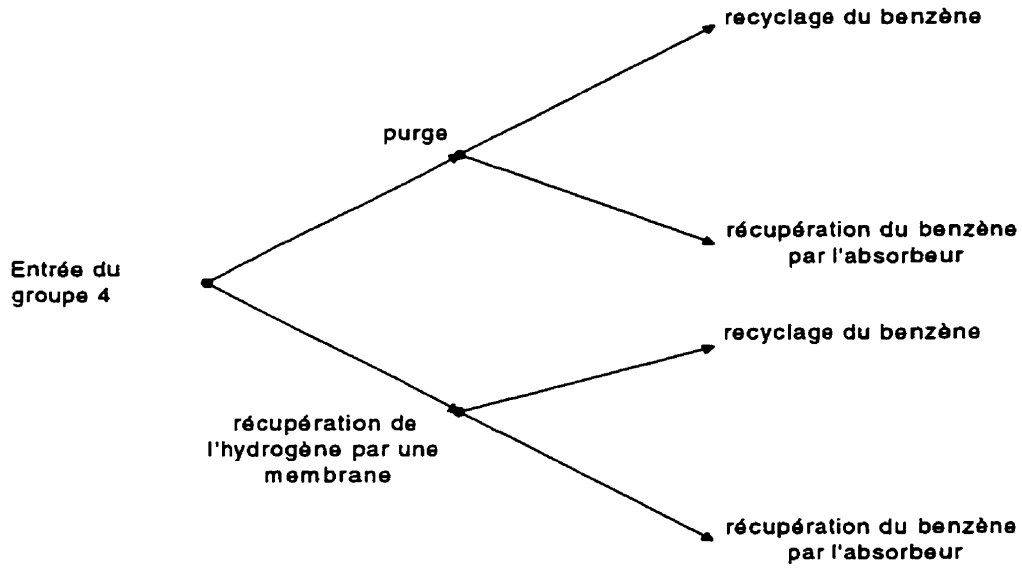


Figure 5.1 : 4 alternatives du groupe 4 (purge et recyclage du gaz)

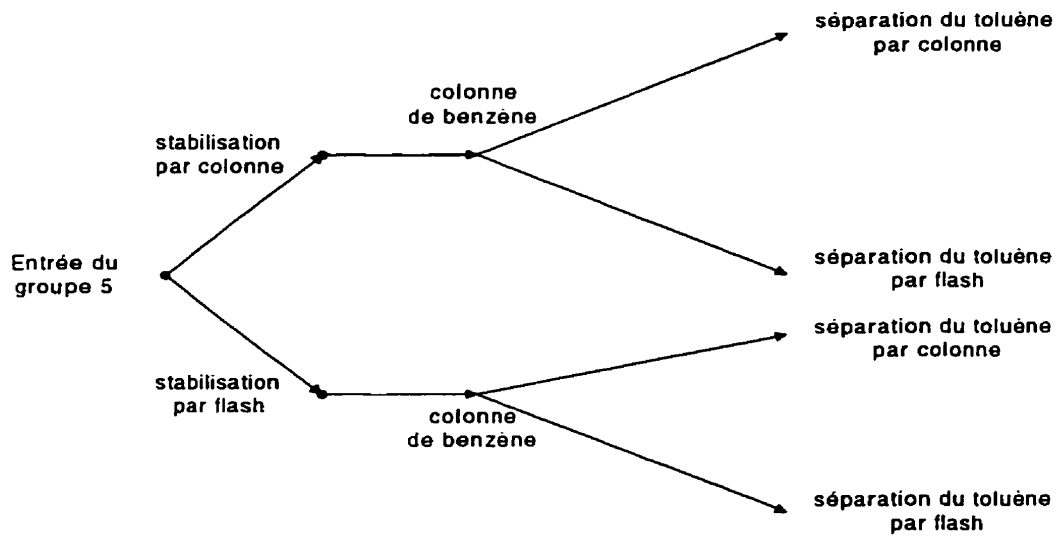


Figure 5.2 : 4 alternatives du groupe 5 (séparation du liquide et recyclage du toluène)

5.2 Identification des structures topologiques incluses dans la superstructure

Chacune des 4 alternatives retenues pour la purge et le recyclage du gaz peut être combinée avec une des 4 alternatives du système de séparation du liquide, ce qui donne alors 16 structures possibles pour la synthèse du benzène. Cependant il y a une restriction pour l'utilisation d'un flash comme stabilisateur, elle est définie comme suit :

- 1) le flash est utilisé comme stabilisateur si seulement l'absorbeur est utilisé, et
- 2) l'utilisation de l'absorbeur est possible sans la présence du flash comme stabilisateur.

Ces liens sont définis à partir de la superstructure de base, en effet le benzène perdu avec la stabilisation par flash (moins parfaite que la colonne) doit être récupéré dans l'absorbeur. Ces deux relations impliquent l'élimination des structures combinant les 2 alternatives du groupe purge et recyclage du gaz incluant un recyclage du benzène (sans la présence de l'absorbeur) avec les 2 alternatives du groupe séparation du liquide utilisant un flash comme stabilisateur. Ceci enlève alors 4 structures topologiques parmi les 16 identifiées auparavant. Le graphe de la figure 5.3 illustre les 12 structures restantes :

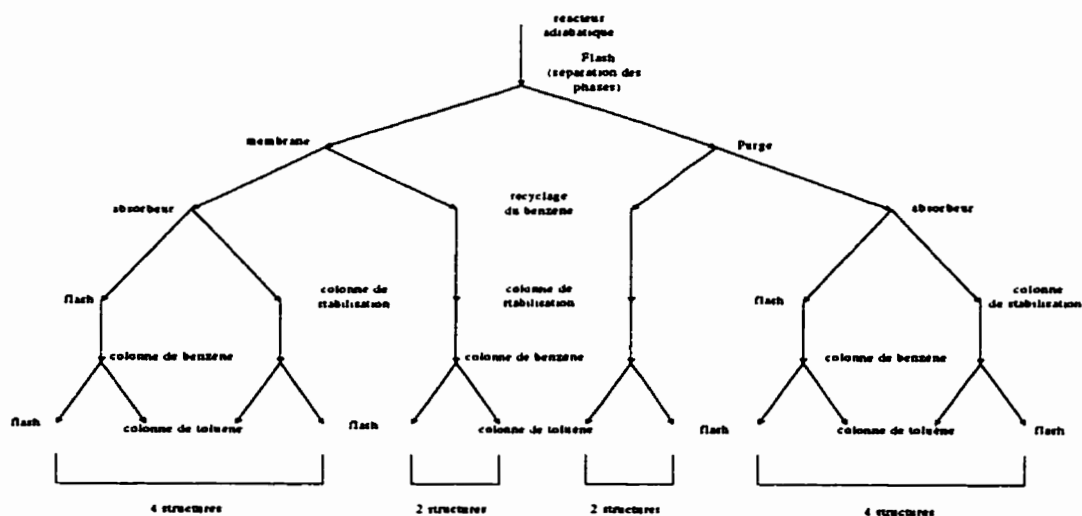


Figure 5.3 : 12 structures topologiques incluses dans la superstructure

5.3 Construction de la superstructure à «procédés concurrents»

On dispose de 12 structures topologiques en compétition pour réaliser la synthèse du benzène, les objectifs restent à déterminer celle qui a le rendement exergetique le plus élevé, mais aussi l'identification des causes de contre performance des différents procédés unitaires. Pour se faire deux stratégies sont possibles :

- 1) il est possible de calculer les rendements exergetiques de chacune des 12 alternatives concurrentes et les charges exergetiques de chacun des 14 procédés unitaires. Cette approche nécessite alors 12 simulations et 148 cas d'études.
- 2) Comme deuxième stratégie, sur la base de trois principes, on développe une nouvelle superstructure dite à «procédés concurrents» qui contient les 12 structures concurrentes regroupées dans un même schéma d'écoulement. Ceci permet alors de faire l'étude simultanée des 12 topologies concurrentes et des différents procédés unitaires.

5.3.1 Principes de construction de la superstructure à «procédés concurrents»

Les trois principes permettent de passer progressivement des 12 schémas d'écoulement indépendants en un seul schéma d'écoulement contenant toutes les 12 structures topologiques. Les principes sont décrits ci dessous :

- PB1) ajustement des débits de matières premières pour avoir des sorties identiques au niveau des alternatives équivalentes,
- PB2) permettre le mélange des courants devant les procédés unitaires dont le rendement exergetique et les consommations d'exergie primaire et d'exergie transformée sont constants quelque soit la structure considérée, et
- PB3) restitution des compositions chimiques à la sortie des procédés décrits dans (PB 2) par des séparateurs fictifs.

5.3.1.1 Principe de base (PB 1)

Pour un groupe donné, s'il existe des alternatives dont la sortie est composée des mêmes composants chimiques avec des débits variables, il est possible de les rendre identiques en ajustant les débits de matières premières à l'entrée de chaque alternative. Ceci est uniquement possible si les composants chimiques qui ont des débits de sortie différents sont des produits frais présents à l'entrée du procédé.

Première application du principe de base PB 1 :

On rappelle les 4 alternatives identifiées du groupe purge du gaz et recyclage :

- 1) purge et recyclage du benzène,
- 2) récupération de l'hydrogène à l'aide d'une membrane et recyclage du benzène,
- 3) purge et récupération du benzène par l'absorbeur, et
- 4) récupération de l'hydrogène par la membrane et récupération du benzène par l'absorbeur.

Les sorties des alternatives (1) et (2) diffèrent par la quantité d'hydrogène, l'utilisation de la membrane permet de récupérer l'hydrogène, la sortie de cette alternative contient alors plus d'hydrogène. Cependant l'hydrogène est présent dans le courant d'alimentation, on peut égaliser les débits de sortie entre les deux options en ajustant les quantités d'hydrogène frais. Un appoint en hydrogène plus important sera nécessaire dans le cas où on effectue une purge.

On obtient ainsi des sorties identiques en ce qui concerne les compositions chimiques pour deux alternatives distinctes. Les paramètres thermomécaniques sont ajustés pour avoir des conditions de température et de pression similaires à l'aide des différents

équipements thermomécaniques internes à chaque alternative (compresseurs, pompes, échangeurs de chaleurs, etc.). La figure 5.4.a illustre le regroupement de courants décrit.

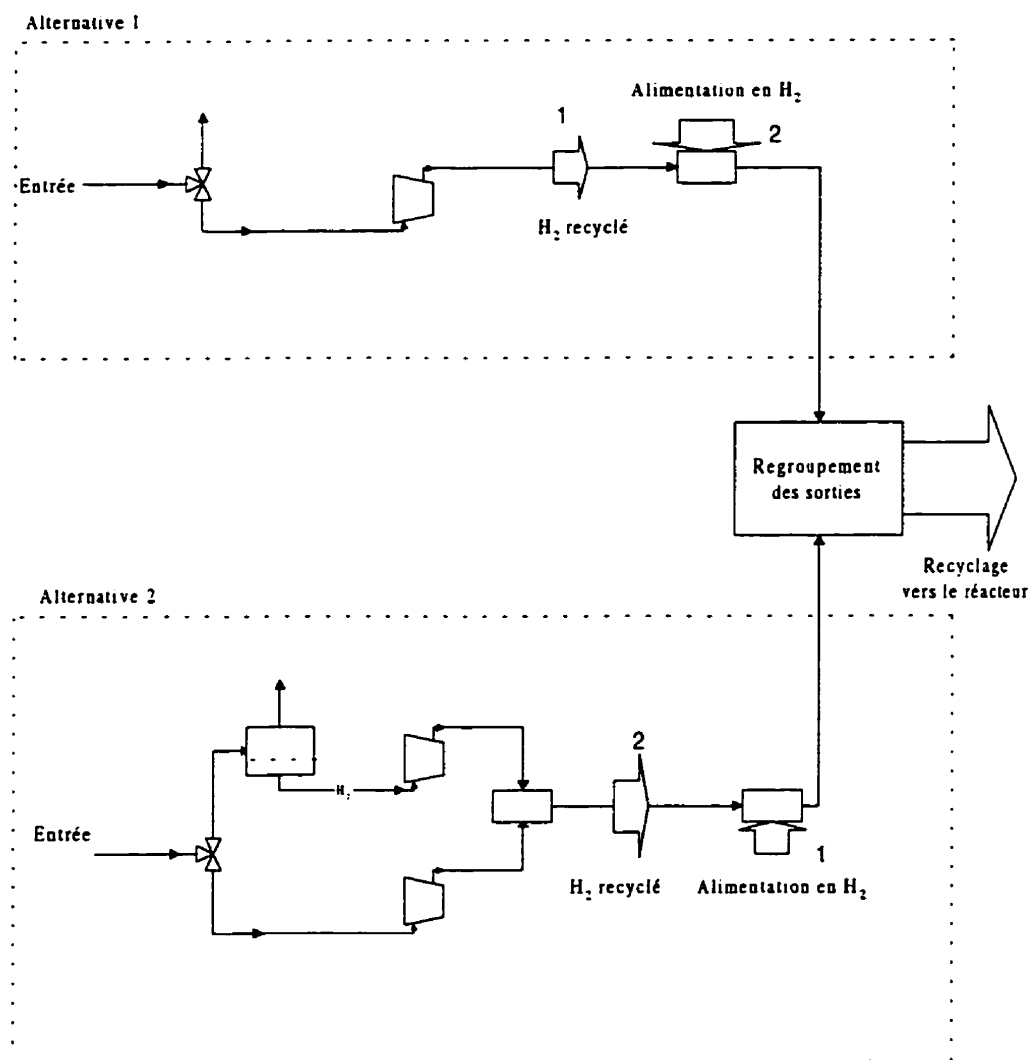


Figure 5.4.a : Regroupement des alternatives (1) et (2) du groupe purge et recyclage du gaz.

La même analyse s'applique pour les alternatives (3) et (4), les sorties de ces dernières sont également regroupées. La figure 5.4.b illustre le regroupement de courants décrit.

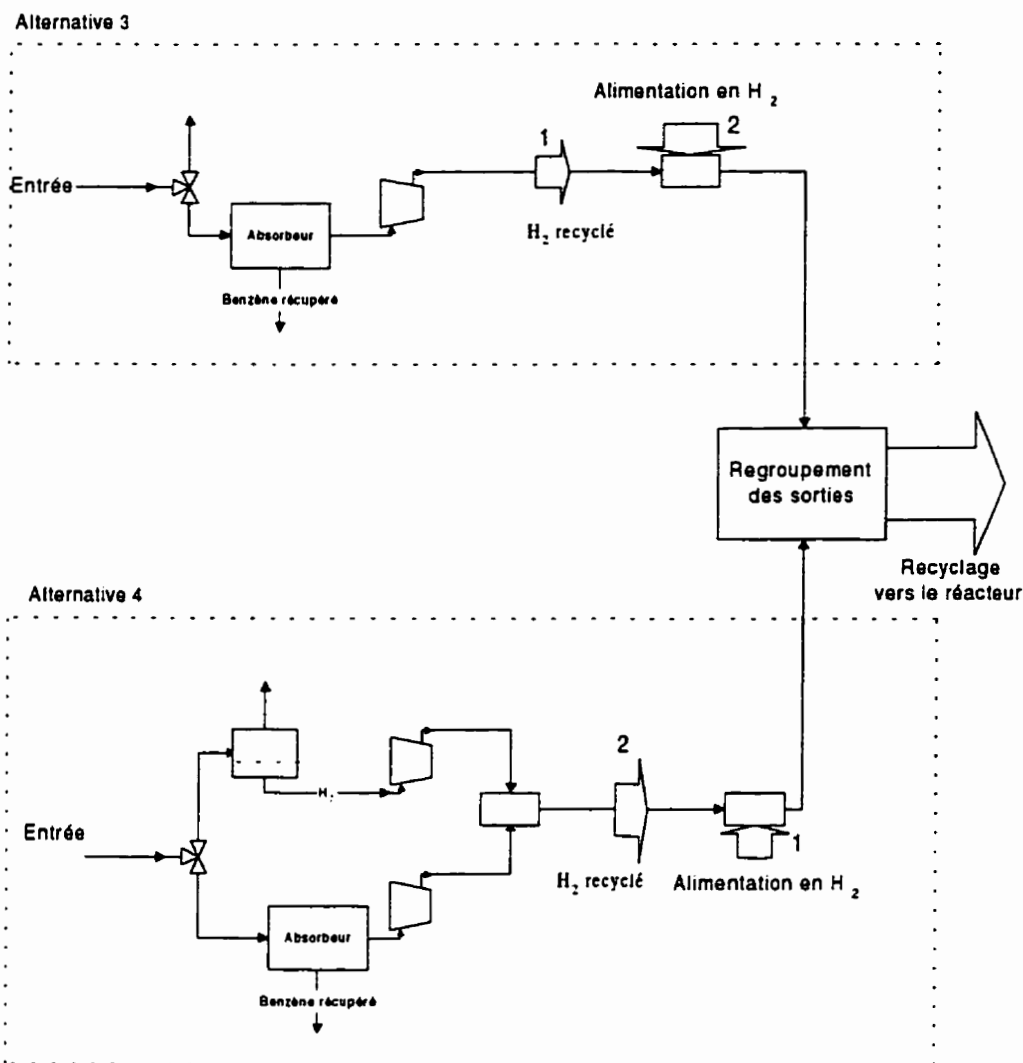


Figure 5.4.b : Regroupement des alternatives (3) et (4) du groupe purge et recyclage du gaz.

On note que les deux regroupements effectués diffèrent par la présence de benzène dans les alternatives (1) et (2), et son absence dans les alternatives (3) et (4). Il n'est alors pas possible de les mélanger par ajustement, le benzène n'étant pas présent à l'entrée du système.

Ces regroupements permettent de réduire le nombre de branches en aval, on passe ainsi de 4 branches distinctes pour le système de réaction à 2 branches.

Deuxième application du principe de base PB 1 :

On rappelle les 2 alternatives identifiées pour la séparation du toluène et du diphenyl :

- 1) séparation par flash, et
- 2) séparation par colonne.

Seul le toluène est recyclé, la composition chimique est alors toujours la même, cependant les débits sont différents. Par ajustement des débits de toluène frais on obtient des sorties identiques comme illustrée par la figure 5.5.

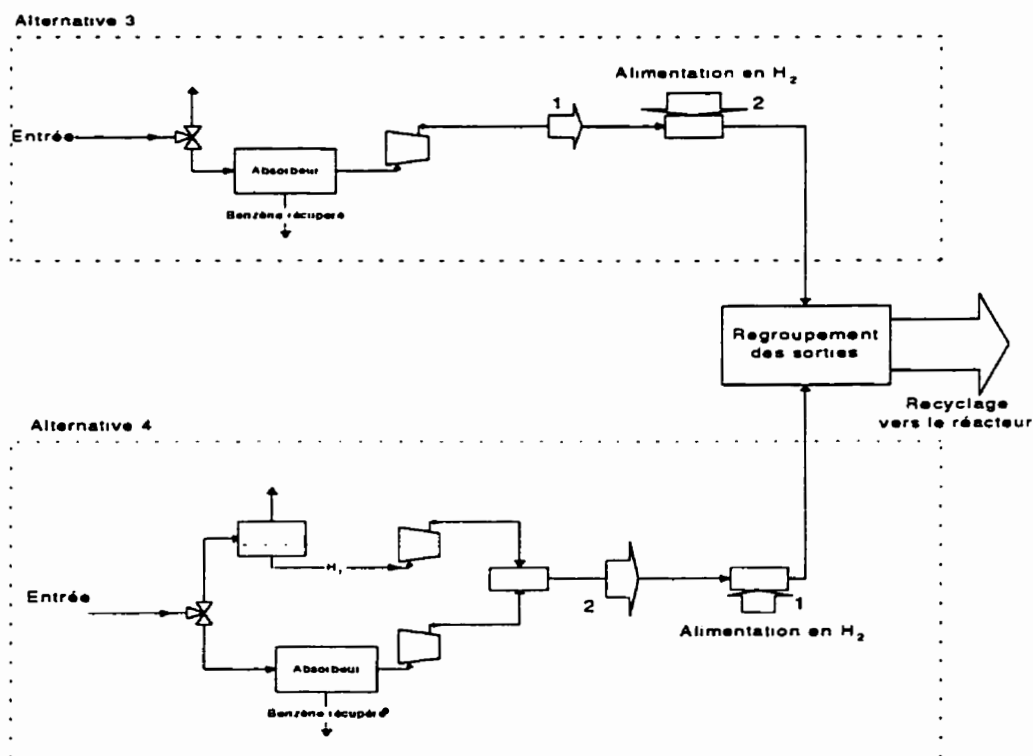


Figure 5.5 : Regroupement des alternatives (1) et (2) du groupe séparation du liquide et recyclage du toluène.

Topologie de la superstructure découlant de l'application du principe de base

PB 1 :

En tenant compte des regroupements décrits précédemment, on constate que le recyclage du gaz présente deux branches distinctes selon que le benzène est recyclé ou récupéré dans l'absorbeur.

A ce niveau, on peut regrouper d'autres courants en montrant que la sortie liquide du flash F1 est constante pour les alternatives déjà regroupées. On considère encore les 4 alternatives du groupe purge et recyclage du gaz décrites plus haut. Pour les alternatives (1) et (2) seule la sortie du flash est acheminée vers le système de séparation du liquide. Pour quantifier les différences à la sortie, nous utilisons les résultats des bilans de matière établis dans le paragraphe 4.2. Le tableau 5.1 résume les compositions molaires des différents composants chimiques.

Tableau 5.1 : compositions molaires à la sortie de la phase liquide du flash
avec les alternatives (1) et (2) du groupe purge et recyclage du gaz.

Alternatives	Compositions molaires				
	H ₂	CH ₄	Benzène	Toluène	Diphényl
Récupération de l'hydrogène et recyclage direct	0,005	0,026	0,711	0,245	0,012
Purge du gaz et recyclage direct	0,0049	0,027	0,71	0,244	0,012
Écarts relatifs en %	2	-3,84	0,14	0,41	0

Pour ces deux alternatives la variation de la composition molaire des courants de matière acheminés vers le système de séparation du liquide est faible. On regroupe alors ces deux sorties en une seule.

Pour les alternatives (3) et (4), deux courants sont acheminés vers le système de séparation du liquide, la sortie du flash et le benzène récupéré et mélangé au toluène utilisé comme absorbant. Le tableau 5.2 résume les bilans de matière spécifiques à ces deux alternatives, il indique les variations de la composition molaire pour chaque cas.

Tableau 5.2 : Compositions molaires à la sortie de la phase liquide du flash F1.

Alternatives	Composition molaires				
	H ₂	CH ₄	Benzène	Toluène	Diphényl
Récupération de l'hydrogène et du benzène	0,0049	0,028	0,702	0,25	0,012
Purge et récupération du benzène	0,005	0,027	0,703	0,25	0,012
Écarts relatifs en %	-2,04	3,57	-0,14	0	0

Également pour ces deux alternatives, les écarts entre les compositions molaires sont faibles, elles peuvent alors être regroupées.

Les regroupements de courants de matière résultant des applications du principe de base PB1 permettent de passer de 12 structures topologiques à deux schémas d'écoulement qui sont représentés par les graphes des figures 5.6.a et 5.6.b.

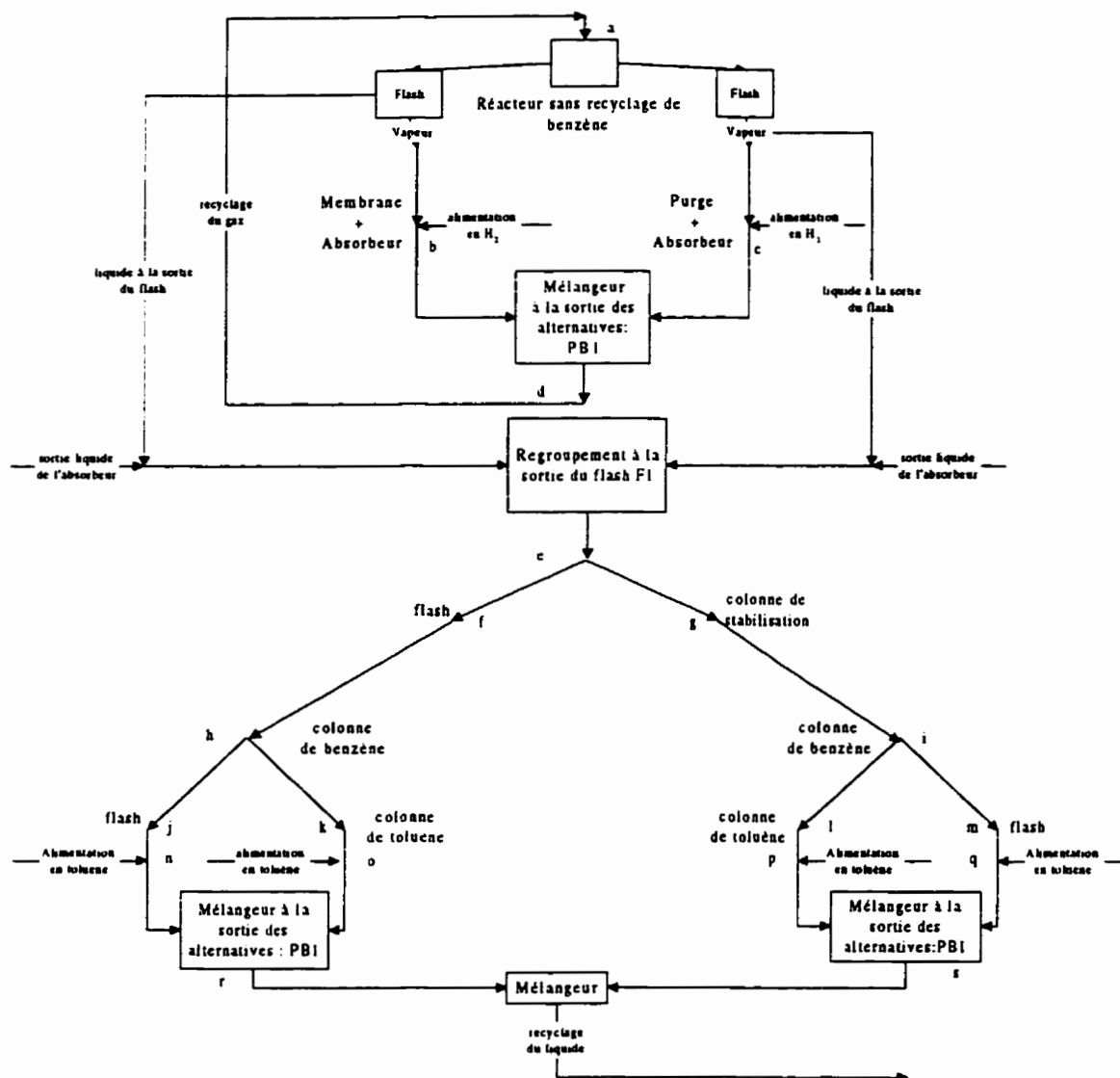


Figure 5.6.a : Topologie de la superstructure à procédés concurrents après l'application de PBI et regroupement des courants à la sortie du flash F1 : branche sans recyclage de benzène.

Description de la branche sans recyclage de benzène (figure 5.6.a) :

Le point (a) représente l'entrée du réacteur. Aux points (b) et (c) chaque alternative est alimentée en hydrogène puis les sorties sont regroupées comme spécifié par l'application

du principe de base 1, la sortie commune (d) est recyclée vers le réacteur au point (a). Les sorties en phase liquide du flash sont d'abord mélangées aux sorties des absorbeurs correspondantes et sont regroupées. La sortie commune (e) est alors acheminée vers le groupe séparation du liquide et recyclage du toluène. On retrouve les alternatives décrites plus haut, aux points (f) et (g), (h) et (i), (j) et (k) et enfin (l) et (m). Les points (n), (o), (p), (q) représentent les alimentations en toluène au niveau de chacune des alternatives dont les sorties sont regroupées en appliquant le principe de base PB 1. Les sorties communes (s) et (t) sont recyclées vers le réacteur au point (a).

Description de la branche avec recyclage de benzène (figure 5.6.b) :

Elle est similaire à la branche précédente, cependant les courants liquides à la sortie des flashes sont acheminés directement vers le groupe séparation du liquide et recyclage du toluène, du fait de l'absence de l'absorbeur. Ceci occasionne également l'élimination d'une branche à savoir l'utilisation d'un flash comme stabilisateur, comme décrit dans le paragraphe 5.2

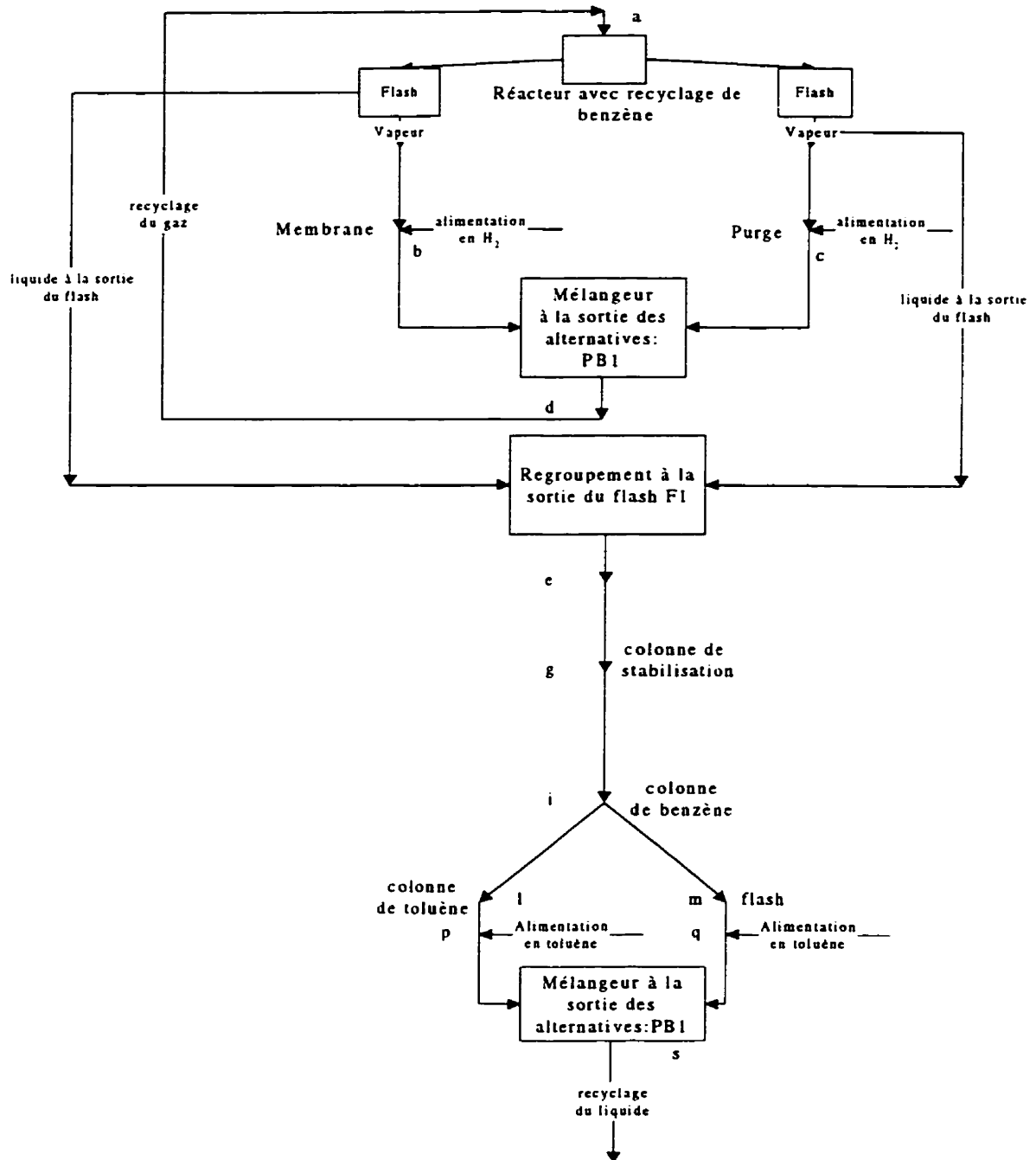


Figure 5.6.b : Topologie de la superstructure à procédés concurrents après l'application de PB 1 et regroupement des courants à la sortie du flash F1 : branche avec recyclage de benzène.

5.3.1.2 Principe de base (PB 2)

Le choix de la structure est basée sur l'évaluation de la charge exergetique des alternatives des différents procédés unitaires. Si pour une alternative donnée le rendement exergetique et les consommations d'exergie sont constants quelque soit la structure dans laquelle elle est combinée alors il est pas nécessaire de le considérer spécifiquement pour chaque cas de structure. À l'entrée d'un tel procédé on peut mélanger les courants venant des différentes alternatives.

Application du principe de base PB 2 :

La séparation des phases à la sortie du réacteur par le flash F1 ne présente qu'une seule alternative. On fait l'analyse de sensibilité du rendement exergetique du flash F1 pour déterminer sa plage de variation ainsi que les variations de la consommation d'exergie en fonction des différentes structures possibles. La simplification effectuée à l'aide du principe de base PB 1 conduit à examiner seulement deux cas selon que le benzène est récupéré ou recyclé dans le réacteur.

En utilisant les simulations du bilan de matière (paragraphe 4.2), nous pouvons accéder à la composition molaire ainsi qu'aux paramètres thermodynamiques à l'entrée et à la sortie du flash F1 pour chaque cas. Les tableaux 5.3.a et 5.3.b résument les valeurs des composantes du rendement exergetique qui est évalué à l'aide de l'équation 3.11, dans le cas d'un recyclage du benzène et dans le cas de la récupération du benzène par l'absorbeur.

Tableau 5.3.a : Paramètres du rendement exergetique du flash F1 : recyclage du benzène.

	Entrée	Sortie	Transit
Exergie thermomécanique (kJ/hr) $\times 10^{-7}$	2,247	2,246	0,89
Exergie chimique (kJ/hr) $\times 10^{-9}$	2,48	2,48	2,48

Tableau 5.3.b : Paramètres du rendement exergetique du flash F1 : récupération du benzène.

	Entrée	Sortie	Transit
Exergie thermomécanique (kJ/hr) $\times 10^{-7}$	2,23	2,22	0,9
Exergie chimique (kJ/hr) $\times 10^{-9}$	2,36	2,36	2,36

Le rendement exergetique est constant dans les deux cas, et est près de 99,8 % .

La consommation d'exergie au niveau du flash peut être classée en deux niveaux :

- 1) consommation d'exergie thermomécanique par la chute de pression, et
- 2) consommation d'exergie chimique par dilution.

Pour rendre compte de l'effet de la perte de pression (1), nous allons la lier au système de réaction qui va englober la vanne à l'entrée du flash. Le flash F1 concentre les composants suivant deux phases, (liquide et vapeur). La consommation d'exergie chimique est due à l'entraînement de composants volatils (hydrogène et méthane) dans la phase liquide et l'entraînement de condensables (benzène, toluène et diphenyl) dans la

phase vapeur. Dans les deux cas, les produits en question vont se retrouver dilués par rapport à leur état à la sortie du réacteur. En utilisant les 4 simulations du bilan de matière (section 4.2.5) nous pouvons évaluer les consommations d'exergie chimique.

Consommation d'exergie chimique primaire :

Les indices des courants correspondent au schéma d'écoulement de la figure 4.3. La consommation d'exergie chimique primaire du toluène est calculée par :

$$CxP_T = n_T^{(8)} * (ex_T^{(7)} - ex_T^{(8)}) \quad (5.1)$$

Consommation d'exergie chimique primaire de l'hydrogène :

$$CxP_H = n_H^{(9)} * (ex_H^{(7)} - ex_H^{(9)}) \quad (5.2)$$

CxP_j = consommation d'exergie chimique primaire en composant j,

ex_j = exergie chimique molaire dans le mélange du composant j (équation 3.3),

H = hydrogène,

i = courant numéro i,

n_j = nombre de moles de la substance j,

T = toluène.

Consommation d'exergie chimique transformée :

consommation d'exergie chimique transformée du benzène :

$$CxT_{BZ} = n_{BZ}^{(9)} * (ex_{BZ}^{(7)} - ex_{BZ}^{(9)}) \quad (5.3)$$

consommation d'exergie chimique transformée du méthane :

$$CxT_M = n_M^{(9)} * (ex_M^{(7)} - ex_M^{(9)}) \quad (5.4)$$

Bz = benzène,

CxT_j = consommation d'exergie chimique transformée relative au composant j,

M = méthane.

Le tableau 5.4 résume les différentes valeurs des expressions des consommations d'exergie transformée en fonction des alternatives et aussi le produit de la surface nette par la consommation totale d'exergie primaire (CTP) qui est exprimée par :

$$BP_i * \eta_{ei} - Bt_i * (1 - \eta_{ei}) . \quad (5.5)$$

Bp_i = consommation d'exergie primaire totale du procédé i,

Bt_i = consommation d'exergie transformée totale du procédé i,

η_{ei} = rendement exergetique du procédé i.

Tableau 5.4 : Consommation d'exergie au niveau du flash en fonction des alternatives

Alternatives	CX_{Pj} (kJ/hr)	CX_{Tj} (kJ/hr)	Surface nette*CTP (kJ/hr)
Purge et recyclage du benzène	38997,64	181639,2	38556,37
Purge et récupération du benzène	38408,27	176700,7	37978,052
Récupération de l'hydrogène et recyclage du benzène	38781,46	174186,9	38355,52
Récupération de l'hydrogène et du benzène.	38153,97	169488,6	37738,68

La variation maximale de l'expression *surface nette*CTP* est de 2,1%. La constance de la surface nette dépend de la valeur de *CTP*, cependant la consommation d'exergie primaire est due à la transformation du toluène dans le réacteur. Le bilan de matière montre (voir tableau 4.2) que la quantité de toluène qui réagit varie légèrement en fonction des alternatives.

La faible variation des paramètres thermodynamiques (rendement et consommation d'exergie) au niveau du flash F1 permet de mélanger les flux de matières devant. On remarque que les conditions de température et de pression à la sortie des flashes sont identiques, en effet à la sortie du réacteur le flux de matières est condensé avant d'être acheminé vers le flash. Le regroupement décrit est illustré sur la figure suivante :

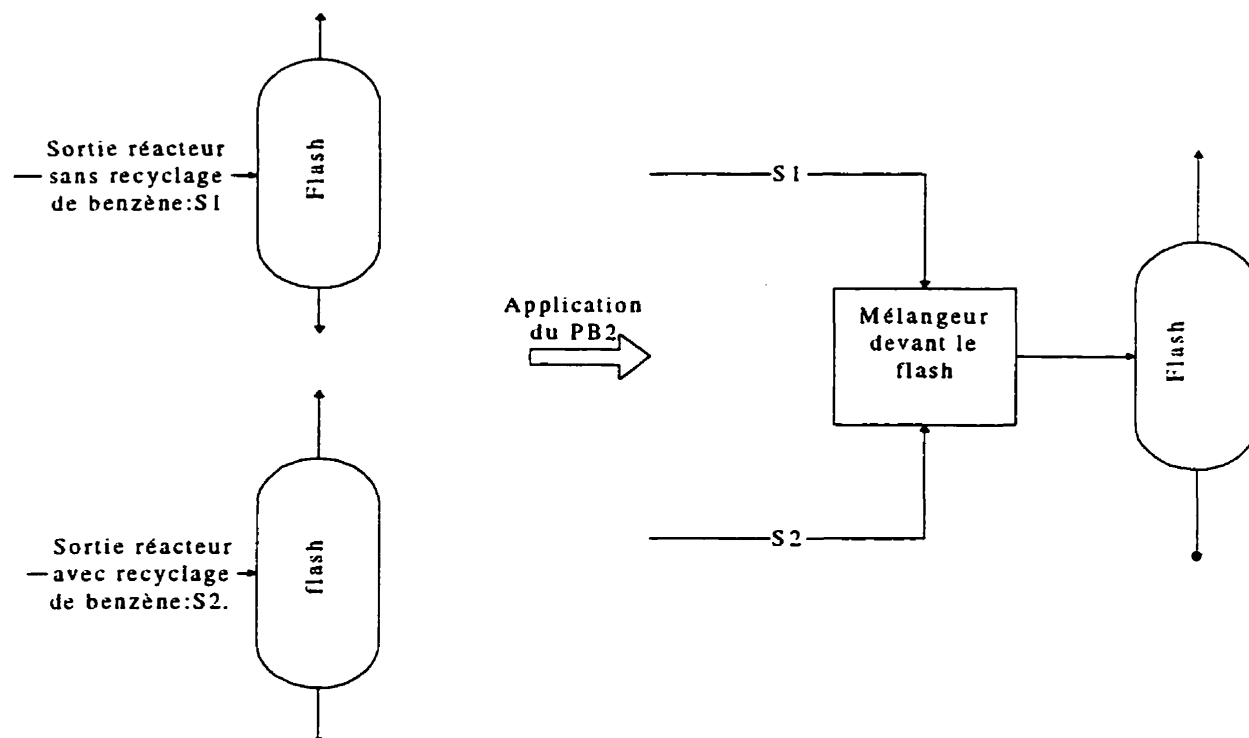


Figure 5.7 : Mélange des courants devant le flash F1

5.3.1.3 Principe de base (PB 3) :

Le regroupement des courants à l'entrée du flash F1 entraîne une modification des compositions molaires des courants de sortie allant vers chacune des structures par rapport au cas où elles opèrent avec des flashes distincts. Ainsi à la sortie du flash, il faudra restituer les compositions molaires à l'entrée des blocs en aval, en répartissant les composants chimiques selon leurs teneurs dans chaque structure à l'aide de séparateurs fictifs. Le modèle *SEP 2* inclus dans le simulateur *ASPEN PLUS* en permet la réalisation,

en effet on peut spécifier à la sortie de ce module la fraction molaire de chaque composant chimique.

Application du principe de base PB 3 :

Les deux branches de sortie aussi bien pour la phase vapeur que pour la phase liquide doivent être corrigées en restituant les compositions correspondantes. La répartition des compositions est basée sur les 4 bilans de matière, on détermine les fractions relatives de chaque composant en tenant compte des différentes alternatives de structure en aval du flash comme indiqué dans l'annexe 6. Ces fractions sont utilisées comme données dans les diviseurs principaux (*SEP 2*) allant vers les groupes et les diviseurs secondaires (*SEP 2*) à l'intérieur des groupes pour les différentes alternatives, les différentes valeurs sont indiquées à l'annexe 6.

Topologie de la superstructure découlant de l'application des principes de base PB 2 et PB 3 :

La topologie représentée par la figure ci dessous intègre le regroupement des courants devant le flash F1 et l'utilisation des séparateurs *SEP 2* pour la restitution des compositions molaires.

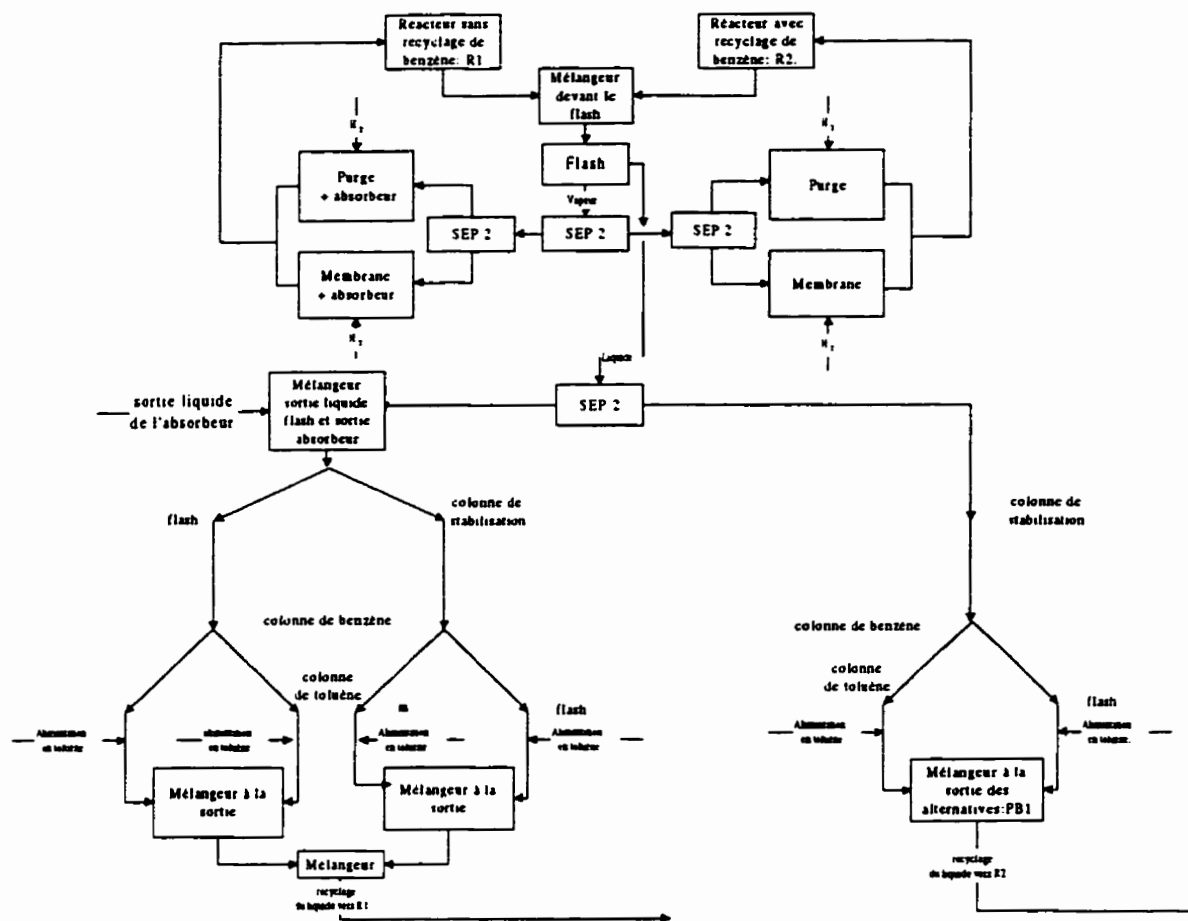


Figure 5.8 : Topologie de la superstructure à « procédés concurrents » après l'application de PB 2 et PB 3.

5.4 Simulation de la superstructure à « procédés concurrents »

Le graphe topologique de la superstructure à « procédés concurrents » (figure 5.8) permet de construire le schéma d'écoulement indiqué à l'annexe 7 pour effectuer la simulation sur *ASPEN*. Il reste à déterminer les modèles de procédés unitaires et les débits de matières premières alimentant chaque groupe.

5.4.1 Choix des modèles des procédés unitaires

Tous les modèles décrits ci-dessous sont disponibles dans le logiciel *ASPEN PLUS*.

Réacteur : on a choisit le modèle *RSTOIC*, ce modèle utilise la table stoechiométrique et les taux de conversion des réactifs pour calculer les valeurs des débits de sortie en fonction des débits à l'entrée. Ce modèle est utilisé dans le cas où on ne dispose pas des données cinétiques des réactions.

Flash : le modèle *FLASH 2* permet de simuler une séparation flash ayant une entrée et deux sorties en deux phases (vapeur et liquide), on peut également spécifier l'ajout d'une quantité de chaleur si nécessaire.

Membrane : On utilise le modèle *SEP 2* couplé à une vanne pour modéliser la membrane. Le modèle permet de spécifier les compositions à chacune des deux sorties, la vanne permet de spécifier la perte de charge sur le courant perméat (hydrogène).

Absorbeur : Avec le modèle *RADFRAC* qui suppose une séparation rigoureuse, il est possible de spécifier qu'il s'agit d'un absorbeur dans l'option *advance*.

Colonne à distiller : On utilise le modèle *DSTWU* qui effectue un calcul du taux de reflux minimum, des quantités de chaleur au condenseur et au rebouilleur. Ce modèle est suffisant pour déterminer les caractéristiques thermodynamiques de la colonne pour le design préliminaire.

Réchauffeur, refroidisseur, vanne : Le modèle *HEATER* permet de modéliser un échangeur de chaleur et une vanne. Dans le cas d'une vanne, on indique la valeur de la perte de charge et on spécifie que la quantité de chaleur échangée est nulle.

5.4.2 Débits de matières premières

Les différentes structures incluses dans la superstructure ne sont pas alimentées par les mêmes débits de matières premières. On se base également sur les 4 bilans de matière (section 4.2.5) qui indiquent les quantités correspondantes à chaque structure. Les débits seront également divisés en autant d'alternatives comprises dans un groupe donné.

On remarque que pour les alternatives combinant l'utilisation de la colonne d'absorption, une partie du débit de toluène frais est pourvue au niveau de l'absorbeur. On tient compte aussi de la perte de toluène frais dans le cas de l'utilisation d'un flash comme séparateur, avec la simulation partielle du flash on détermine qu'elle s'établit à près de 3% comme indiqué sur les graphiques de l'annexe 5. Ainsi l'alimentation en toluène de cette alternative sera augmentée de cette valeur par rapport à celle qui utilise une colonne comme séparateur.

Les valeurs des débits de matières premières sont corrigées toutes dans les mêmes proportions lors de la simulation pour respecter la spécification de la production de benzène. Les différents débits sont indiqués sur les tableaux 5.5 à 5.7 :

Tableau 5.5 : Débits d'hydrogène frais alimentant les 4 alternatives de recyclage du gaz.

Alternatives	Débits d'hydrogène (kmol / hr)
Purge et recyclage du benzène	195
Récupération de l'hydrogène et recyclage du benzène	68,72
Purge et récupération du benzène	194,617
Récupération de l'hydrogène et du benzène	69,014

Tableau 5.6 : Débits de toluène frais alimentant les alternatives combinant l'absorbeur

Alternatives	Débits à l'absorbeur (kmol / hr)	Débits de toluène alimentant les alternatives (kmol / hr)
Stabilisation par colonne et séparation du toluène par une colonne	5,6	31,58
Stabilisation par colonne et séparation du toluène par flash	5,6	32,53
Stabilisation par flash et séparation du toluène par une colonne	5,6	31,9
Stabilisation par flash et Séparation du toluène par flash	5,6	32,8

Tableau 5.7 : Débits de toluène frais alimentant les alternatives
ne combinant pas l'absorbeur.

Alternatives	Débits de toluène (kmol /hr)
Stabilisation par colonne et séparation du toluène par une colonne	68,96
Stabilisation par colonne et séparation du toluène par flash	71,04

CHAPITRE 6
RÉDUCTION DE LA SUPERSTRUCTURE
PAR LA MÉTHODE DE REDISTRIBUTION DES CHARGES,
DÉTERMINATION DES UTILITÉS CHAUDE ET FROIDE
POUR LE RÉSEAU D'ÉCHANGEURS DE CHALEUR.

La simulation de la superstructure (chapitre 5) permet d'accéder aux paramètres permettant de calculer les rendements et les consommations exergétiques des différents procédés unitaires de la superstructure. Les structures en compétition sont alors comparées en évaluant les charges exergétiques à travers les surfaces nettes (équation 3.13) des différents procédés unitaires les constituant. La réduction de la superstructure est effectuée en 3 étapes, à chaque étape on a divisé le schéma d'écoulement en blocs à l'intérieur desquels on élimine les alternatives de procédés unitaires les moins performantes.

Définition des blocs de procédés unitaires :

Un bloc est une surface de contrôle englobant des procédés unitaires caractérisés par des paramètres chimiques et thermomécaniques identiques à l'entrée et à la sortie.

Description des 3 étapes de la réduction :

- 1) pour la première réduction, les blocs sont construits au niveau des groupes de sous procédés définis au paragraphe 4.1. Les blocs sont constitués d'alternatives de procédés unitaires qui sont localement en compétition dans les groupes respectifs,
- 2) pour la deuxième réduction, les blocs sont également construits au niveau des groupes de sous procédés, cependant les alternatives conséquentes sont regroupées, et
- 3) enfin pour la 3 troisième réduction, les blocs sont constitués d'alternatives conséquentes appartenant à des groupes différents.

6.1 Première réduction : 12 structures topologiques en compétition, 5 blocs

Pour la première réduction, le schéma d'écoulement est divisé en 5 blocs :

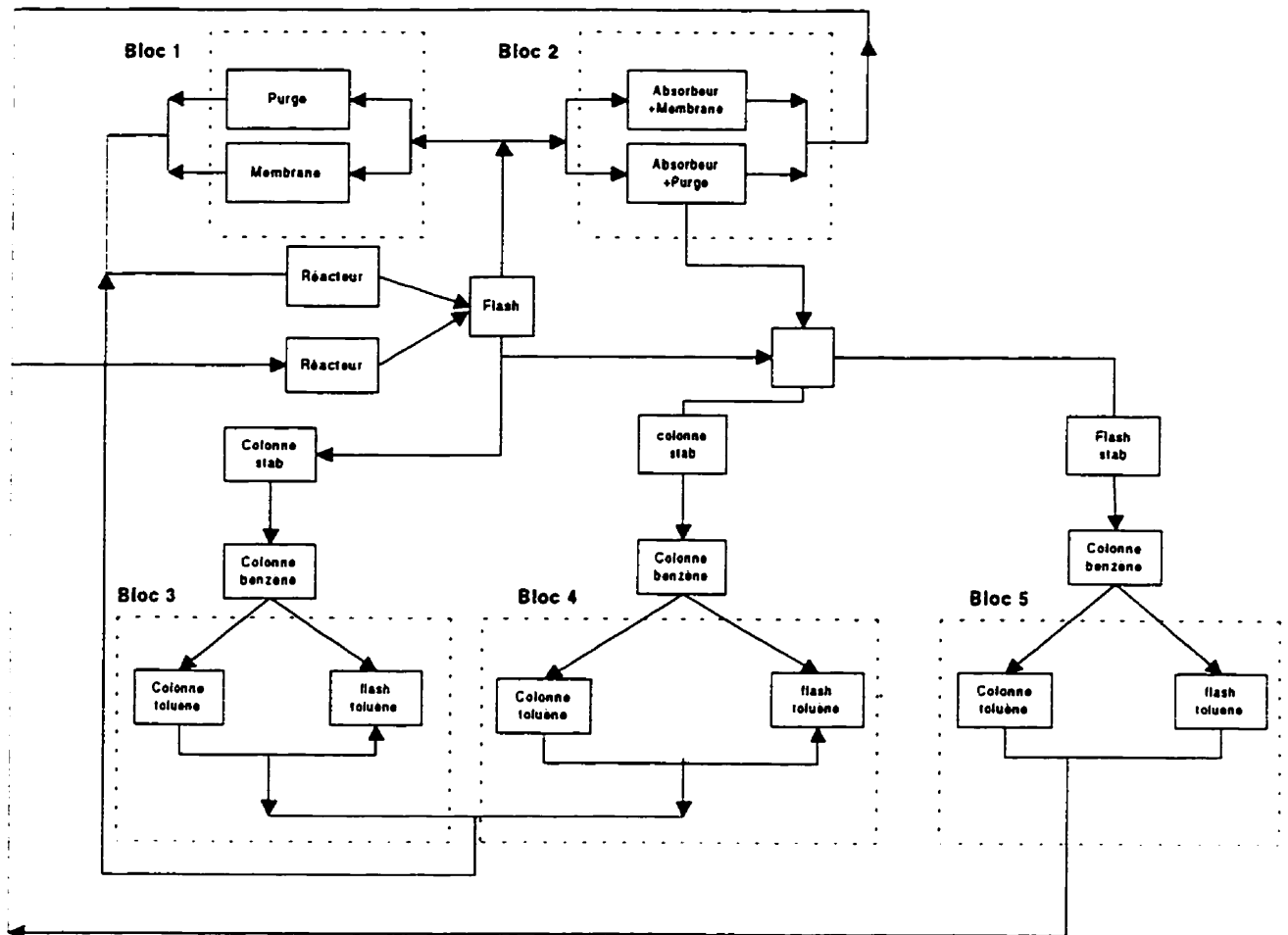


Figure 6.1 : 5 blocs de la 1ere réduction

6.1.1 Alternatives de procédés unitaires en compétition au niveau de chaque bloc pour la première réduction

Bloc 1 :

Le bloc 1 contient deux procédés unitaires concurrents appartenant au groupe purge et recyclage du gaz :

B1- a) purge et recyclage du benzène, et

B1-b) récupération de l'hydrogène et recyclage du benzène.

Bloc 2 :

Le bloc 2 contient deux procédés unitaires concurrents appartenant au groupe purge et recyclage du gaz :

B2-a) purge et récupération du benzène par l'absorbeur, et

B2-b) récupération de l'hydrogène par la membrane et du benzène par l'absorbeur.

Bloc 3 :

Le bloc 3 contient deux procédés unitaires concurrents appartenant au groupe séparation du liquide que sont :

B3-a) séparation du toluène par une colonne, et

B3-b) séparation du toluène par flash.

Bloc 4 :

Le bloc 4 contient deux procédés unitaires concurrents appartenant au groupe séparation du liquide :

B4-a) séparation du toluène par une colonne, et

B4-b) séparation du toluène par flash.

Bloc 5 :

Le bloc 5 contient deux procédés unitaires concurrents appartenant au groupe séparation du liquide :

B5-a) séparation du toluène par une colonne, et

B5-b) séparation du toluène par flash.

Les blocs 4, 5 et 6 sont constitués des mêmes procédés unitaires en compétition, cependant les conditions des flux de matières à l'entrée de chaque bloc sont différentes. Les différences sont fonction de l'absence de l'absorbeur et de l'utilisation d'une colonne de stabilisation comme étapes précédentes au niveau du bloc 3. Les blocs 4 et 5 sont alimentés en partie par un flux de matières provenant de l'absorbeur, la différence entre les deux se situe au niveau de la stabilisation. En effet les procédés unitaires du bloc 4 sont précédés par une colonne de stabilisation alors que pour le bloc 5, ils sont précédés par un flash comme stabilisateur.

La constance des sorties des alternatives de procédés unitaires concurrents au niveau de chaque bloc permet de les isoler sans affecter les procédés en aval. Au niveau de chaque bloc, la surface nette (équation 3.13) de chaque procédé unitaire est évaluée, les procédés unitaires ayant les plus faibles surfaces nettes sont alors éliminés.

La séparation équitable ou corrigée (module *SEP 2*) des débits à l'entrée des blocs entre alternatives concurrentes permet de faire une redistribution directe des charges en se basant uniquement sur les surfaces nettes. En effet une redistribution des charges peut entraîner une variation des consommations d'exergie primaire ou transformée modifiant ainsi l'influence du procédé unitaire sur le rendement global. Cependant, les conditions à l'entrée des procédés concurrents étant dans les mêmes conditions, le rapport des surfaces nettes entre deux blocs reste constant dans le cas d'une redistribution sur l'un ou sur l'autre.

6.1.2 Calcul des rendements exergetiques et des consommations d'exergie des procédés unitaires pour la première réduction

Calcul des rendements exergetiques :

L'annexe 7 montre la superstructure avec les numéros des courants. Les spécifications des courants d'entrée et de sortie des différents blocs ainsi que les parcours d'exergie en transit sont indiqués dans l'annexe 8. Les rendements exergetiques sont évalués à l'aide de l'équation 3.11, les valeurs numériques sont indiquées sur le tableau 6.1 .

Tableau 6.1 : Valeurs numériques du rendement exergetique des différents procédés unitaires en compétition pour la 1ere réduction.

Procédés unitaires	Rendement Exergetique en %
B1-a	1,38
B1-b	4,32
B2-a	3,61
B2-b	5,65
B3-a	61,7
B3-b	57,6
B4-a	64,6
B4-b	57,38
B5-a	64
B5-b	57,3

Calcul des consommations d'exergie :

Le paragraphe 3.4 détaille les notions de consommation d'exergie primaire et transformée. Les expressions algébriques des consommations d'exergie pour chacun des

procédés unitaires sont indiquées dans l'annexe 9. Les valeurs numériques des consommations d'exergie primaire (B_p) et transformée (B_t), les fractions d'exergie primaire (λ_p) et transformée (λ_t) sont indiquées sur le tableau 6.2.a, les surfaces positives, négatives et nettes sont indiquées sur le tableau 6.2.b.

Tableau 6.2.a : Spécification des paramètres exergetiques des procédés unitaires concurrents: consommations et fractions d'exergie primaire et transformée.

Procédés unitaires	$B_p \times 10^{-6}$ (kJ /hr)	$B_t \times 10^{-6}$ (kJ/hr)	η_{ex}	λ_p	λ_t
B1-a	1,98	102	0,0138	$1,62 \cdot 10^{-3}$	0,0831
B1-b	2,41	66,1	0,0234	$1,97 \cdot 10^{-3}$	0,0541
B2-a	1,94	100	0,0361	$1,58 \cdot 10^{-3}$	0,082
B2-b	2,05	66,1	0,0565	$1,68 \cdot 10^{-3}$	0,054
B3-a	0	0,079	0,617	0	$6,46 \cdot 10^{-5}$
B3-b	0,019	0,196	0,576	$1,61 \cdot 10^{-5}$	$1,6 \cdot 10^{-3}$
B4-a	0	0,046	0,646	0	$3,75 \cdot 10^{-5}$
B4-b	0,0099	0,116	0,574	$8,02 \cdot 10^{-6}$	$9,5 \cdot 10^{-5}$
B5-a	0	0,046	0,64	0	$3,75 \cdot 10^{-5}$
B5-b	0,0096	0,116	0,57	$7,82 \cdot 10^{-6}$	$9,47 \cdot 10^{-5}$

Tableau 6.2.b : Spécification des paramètres exergetiques des procédés unitaires concurrents : surfaces positive, négative et nette.

Blocs	Surface positive ($\eta_a \cdot \lambda_{pi}$)	Surface négative ($(1-\eta_a) \cdot \lambda_{ii}$)	Surface nette
B1-a	$2,23 \times 10^{-5}$	-0,082	-0,082
B1-b	$4,62 \times 10^{-5}$	-0,053	-0,053
B2-a	$5,72 \times 10^{-5}$	-0,079	-0,079
B2-b	$9,48 \times 10^{-5}$	-0,051	-0,051
B3-a	0	$-2,5 \times 10^{-5}$	$-2,5 \times 10^{-5}$
B3-b	$9,24 \times 10^{-6}$	$-6,8 \times 10^{-5}$	$-5,9 \times 10^{-5}$
B4-a	0	$-1,3 \times 10^{-5}$	$-1,3 \times 10^{-5}$
B4-b	$4,6 \times 10^{-6}$	$-4,1 \times 10^{-5}$	$-3,6 \times 10^{-5}$
B5-a	0	$-1,4 \times 10^{-5}$	$-1,4 \times 10^{-5}$
B5-b	$4,48 \times 10^{-6}$	-4×10^{-5}	$-3,6 \times 10^{-5}$

6.1.3 Analyse des charges exergetiques et élimination de procédés unitaires pour la première réduction

Bloc 1 : le rendement exergetique du procédé B1-a (purge et recyclage du benzène) est plus faible que celui du procédé B1-b, ceci est dû aux pertes par rejets. Ces pertes occasionnent une grande consommation d'exergie transformée, à cause du fait que les produits sont concentrés au niveau du flash et rejetés à la purge. Au niveau du procédé B1-a, la réduction des pertes par la récupération de l'hydrogène est réalisée à l'aide de la membrane qui consomme de l'exergie primaire au niveau du compresseur, mais également de l'exergie transformée dû à la perte de pression à travers la membrane. Globalement, le procédé B1-a consomme moins d'exergie primaire et plus d'exergie transformée avec un

rendement plus faible. Son impact sur le rendement global déterminé à l'aide de la surface nette est plus négatif que celui du procédé B1-b. Ainsi les charges seront redistribuées du procédé B1-a vers le procédé B1-b comme illustré par la figure 6.2.a.

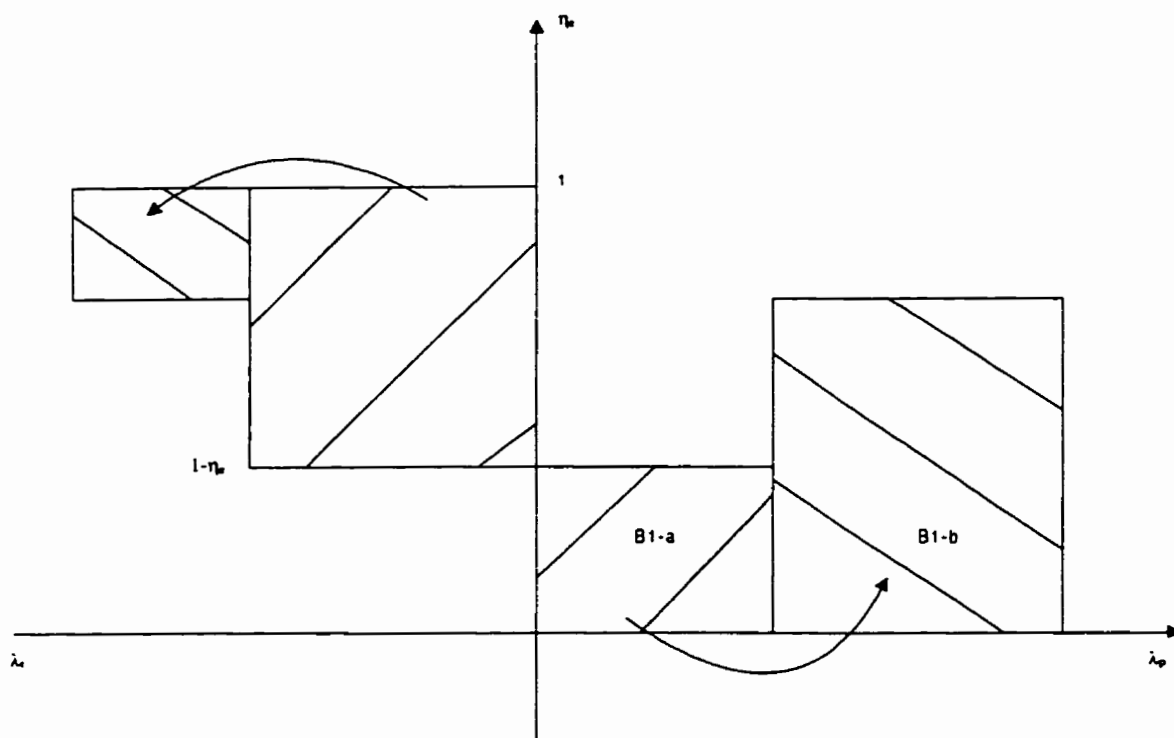


Figure 6.2.a : diagramme des charges des alternatives B1-a (purge et recyclage du benzène) et B1-b (récupération de l'hydrogène et recyclage du benzène)

Bloc 2 : le scénario est le même que pour les deux alternatives de procédés unitaires du bloc 1, avec une réduction des pertes dans les deux alternatives B1-a et B1-b par la récupération du benzène à l'aide de l'absorbeur. La figure 6.2.b montre les diagrammes des charges des alternatives B2-a et B2-b ainsi que la direction de la redistribution des charges.

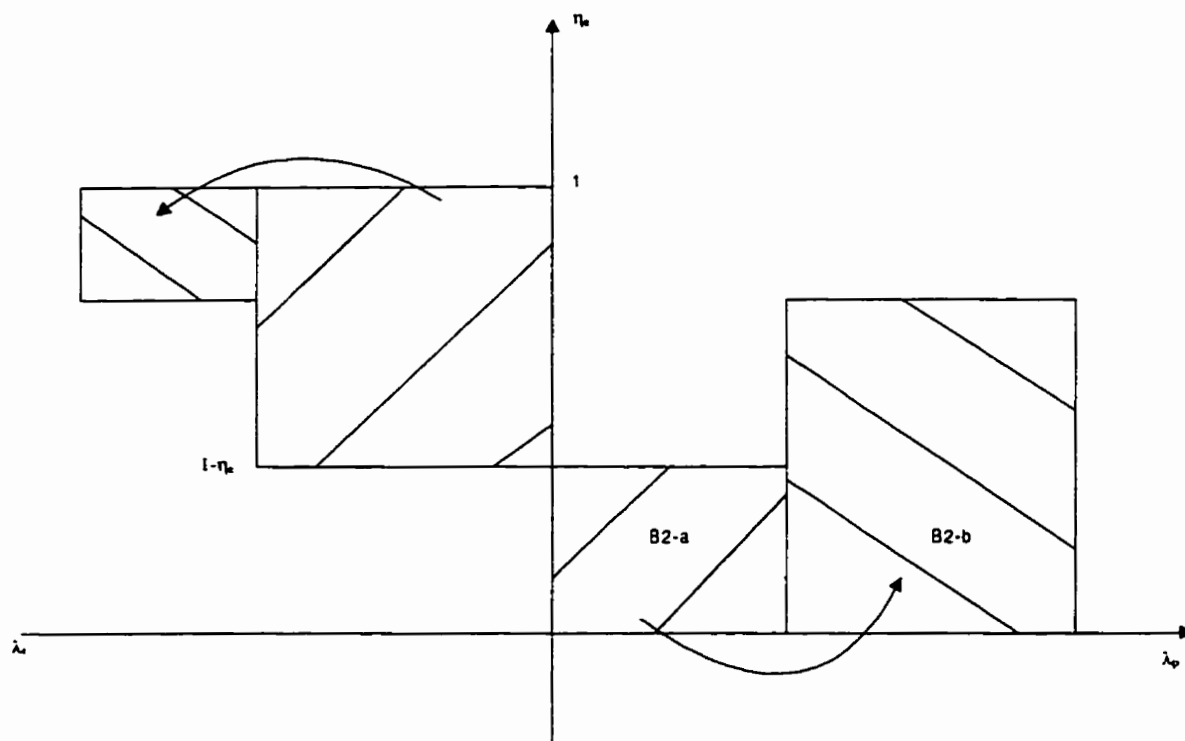


Figure 6.2.b : diagramme des charges des alternatives B2-a (purge et récupération du benzène) et B2-b (récupération de l'hydrogène et récupération benzène)

Bloc 3 : on note une faible consommation d'exergie chimique au niveau des alternatives du bloc 3, ceci par le fait que les produits sont séparés et concentrés. Par contre les variations de pressions entre les différentes colonnes occasionnent des consommations en exergie thermomécanique. L'alternative B3-a (séparation du toluène par une colonne) occasionne uniquement une consommation d'exergie transformée, mais plus faible que pour l'alternative B3-b (séparation du toluène par flash). L'accroissement de la consommation d'exergie transformée est due à la faible pression (sous vide) au niveau du flash de séparation du toluène. Ce vide entraîne également une consommation d'exergie thermomécanique par compression, on trouve également dans cette consommation les

raisons de la réduction du rendement exergetique de cette alternative. Globalement l'impact de l'alternative B3-b est plus négatif .

Bloc 4 : les alternatives au niveau de ce bloc présente le même scénario que pour celles du bloc 3.

Bloc 5 : ici également, on note la même situation que pour le bloc 3.

Les figures 6.3.a, 6.3.b, et 6.3.c indiquent les diagrammes des charges des alternatives B3-a et B3-b; B4-a et B4-b; B5-a et B5-b.

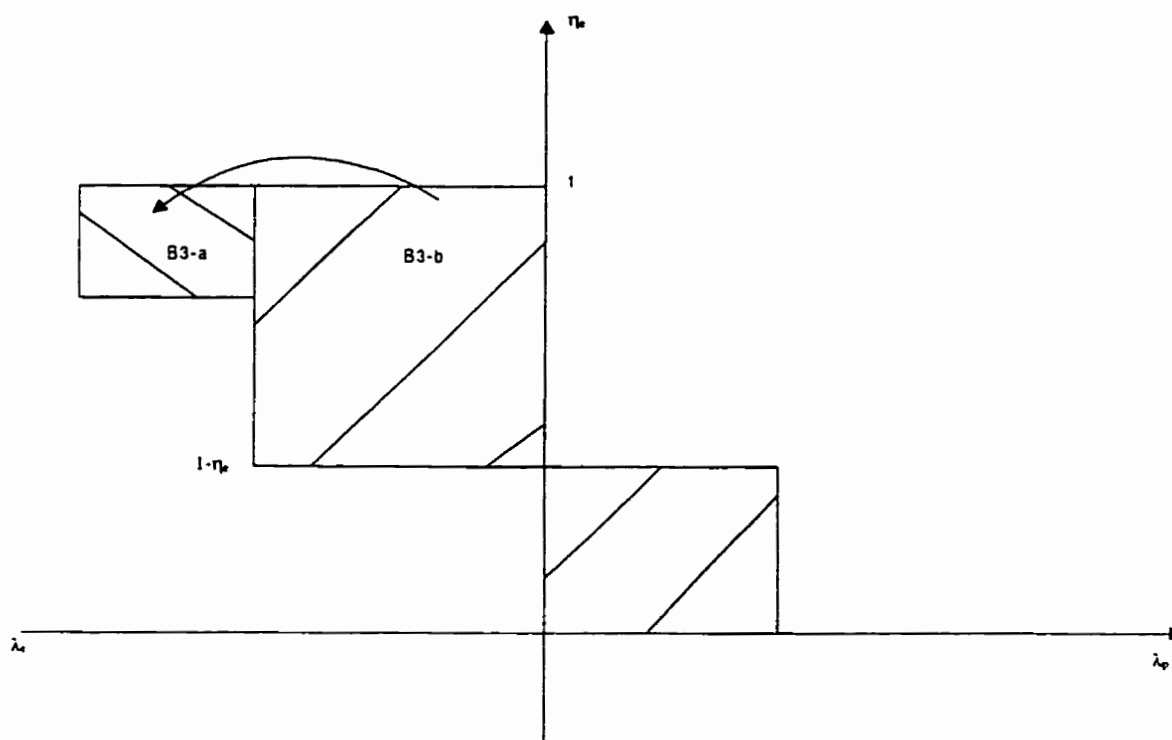


Figure 6.3.a : diagramme des charges des alternatives B3-a (colonne de toluène)
et B3-b (flash de toluène), sans utilisation de l'absorbeur et stabilisation
par colonne.

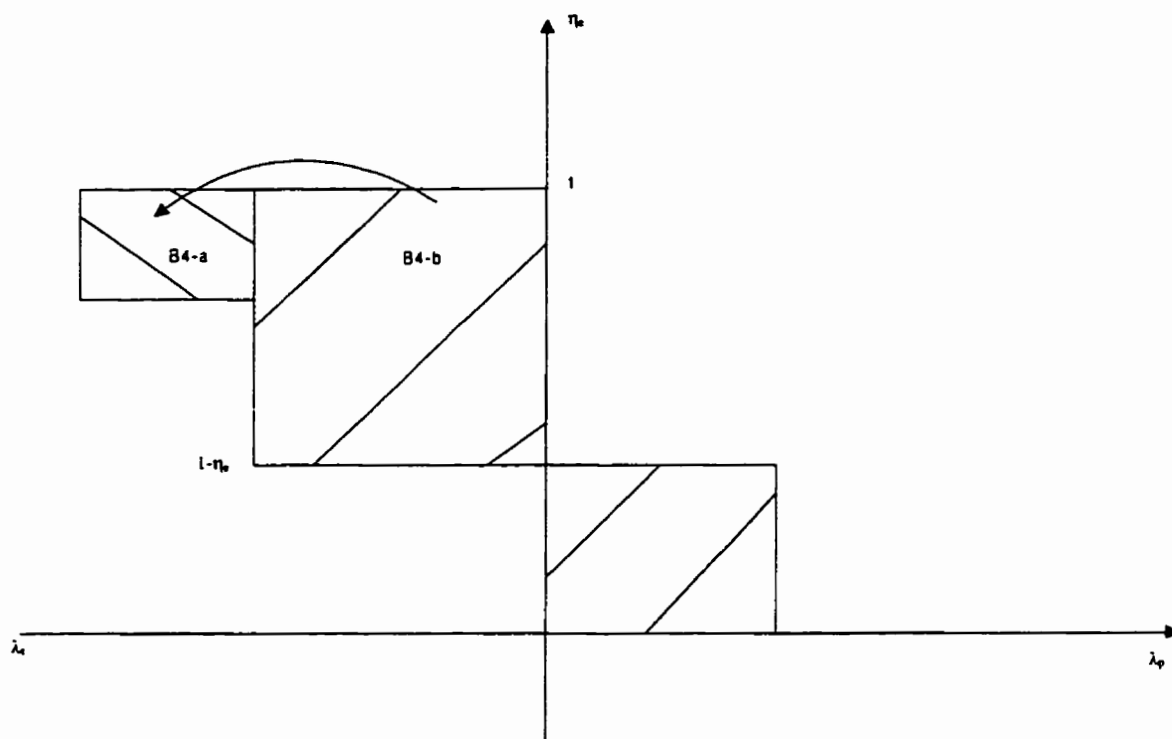


Figure 6.3.b : diagramme des charges des alternatives B4-a (colonne de toluène) et B4-b (flash de toluène) avec utilisation de l'absorbeur et stabilisation par colonne.

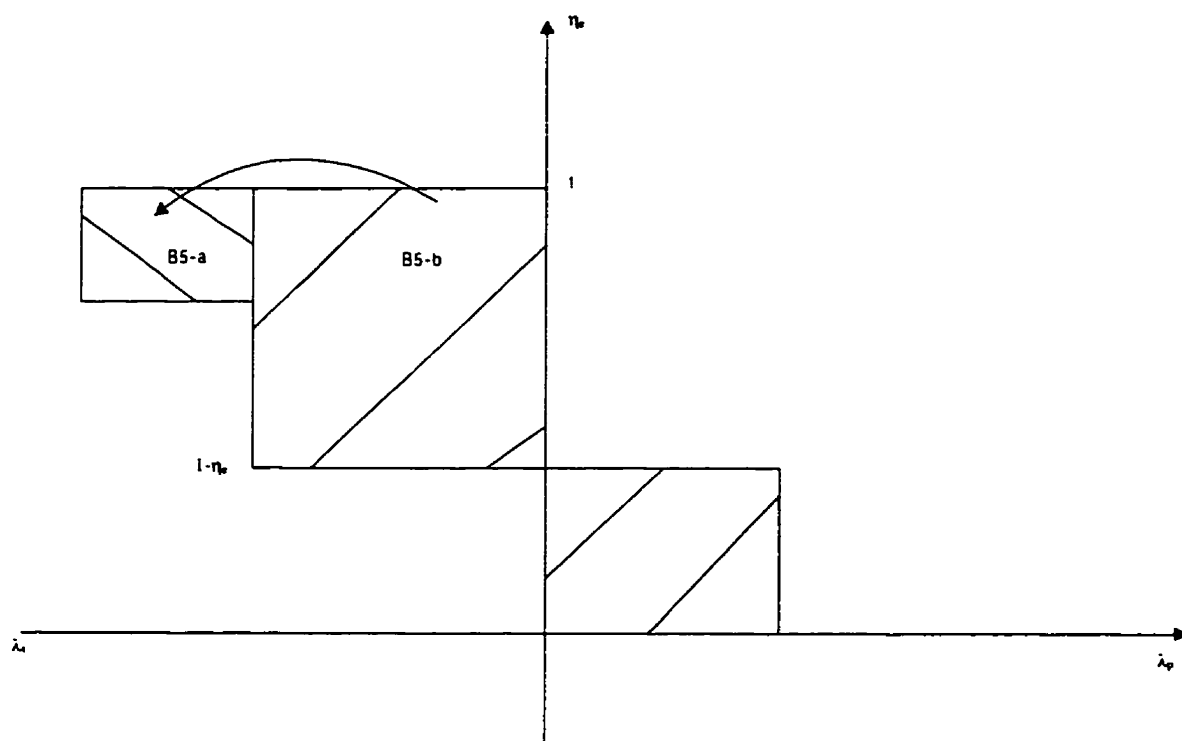


Figure 6.3.c : diagramme des charges des alternatives B5-a (colonne de toluène) et B5-b (flash de toluène), avec utilisation de l'absorbeur et stabilisation par flash.

6.2 Graphe des alternatives restantes après la première réduction

L'élimination des procédés unitaires décrits plus haut, réduit le nombre de structures topologiques. En effet les combinaisons incluant ces procédés en question sont exclues, le nombre d'alternatives restant est alors de 3 comme illustré par la figure 6.4.

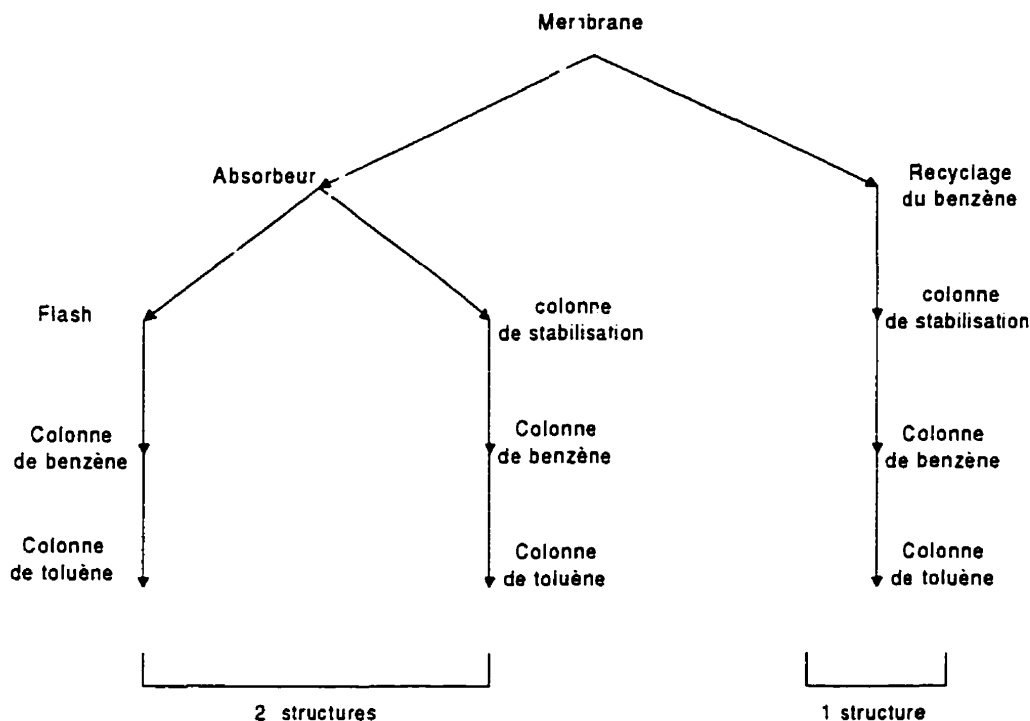


Figure 6.4 : 3 structures topologiques restantes après la 1^{ère} réduction.

Les alternatives restantes sont :

- 1) récupération de l'hydrogène et recyclage direct du gaz, stabilisation par colonne, séparation du benzène par colonne, séparation du toluène par colonne,
- 2) récupération de l'hydrogène et récupération du benzène par l'absorbeur, stabilisation par une colonne, séparation du benzène par colonne, séparation du toluène par colonne,
- 3) récupération de l'hydrogène et récupération du benzène par l'absorbeur, stabilisation par un flash, séparation du benzène par colonne, séparation du toluène par colonne.

6.3 Deuxième réduction : 3 structures topologiques en compétition, 1 bloc

Le schéma d'écoulement des structures restantes est représenté par la figure 6.5, on y indique aussi le bloc 6 défini pour la deuxième réduction.

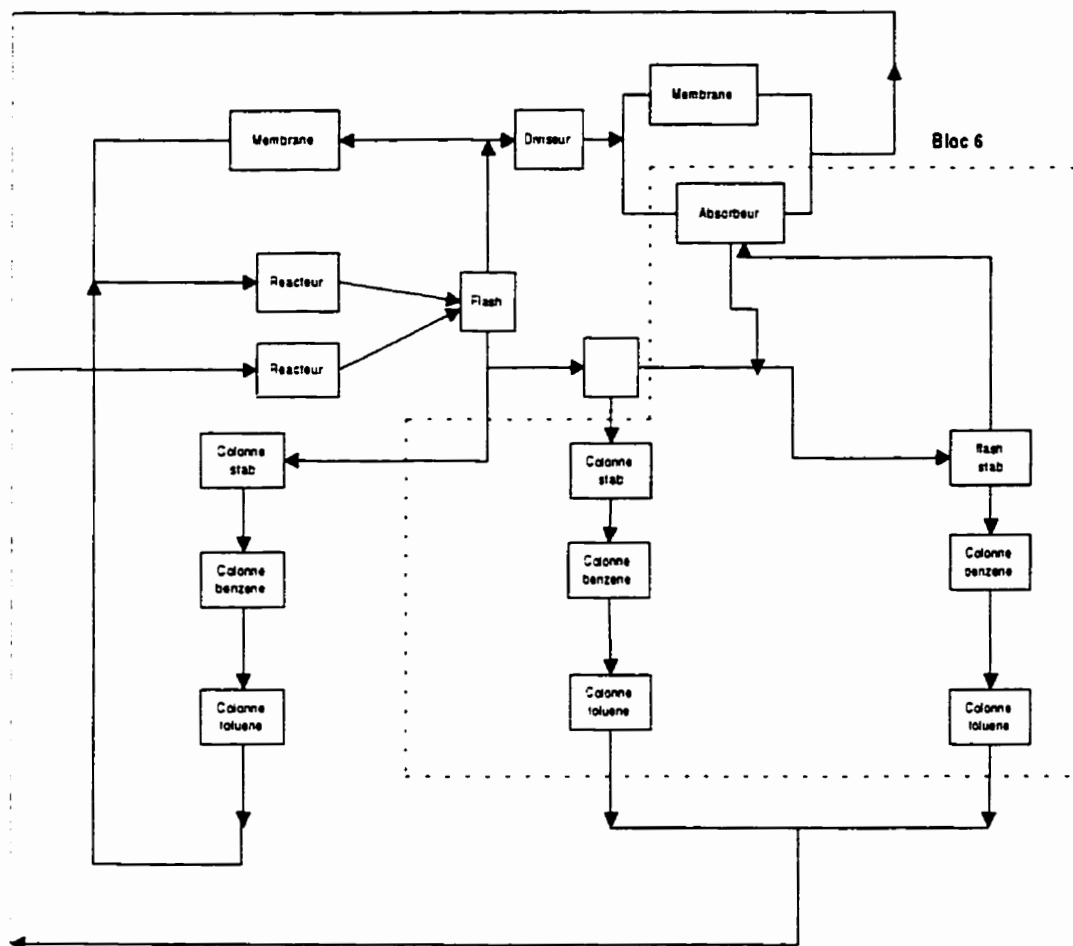


Figure 6.5 : 1 bloc pour la 2eme réduction

6.3.1 Alternatives de procédés unitaires en compétition au niveau du bloc pour la deuxième réduction

Le bloc 6 identifié pour la deuxième réduction contient en plus de l'absorbeur, les alternatives suivantes divisées chacune en deux composantes.

B6-a) 1ere alternative :

B6-a1) stabilisation par colonne et séparation du benzène par une colonne, et

B6-a2) séparation du toluène par colonne.

B6-b) 2eme alternative :

B6-b1) stabilisation par flash et séparation du benzène par une colonne, et

B6-b2) séparation du toluène par colonne.

Au niveau de chaque alternative, les procédés unitaires cités sont conséquents, la surface nette de l'alternative est égale à la somme des surfaces nettes de ses constituants. L'alternative qui a la plus faible surface nette est éliminée.

6.3.2 Calcul des rendements exergetiques et des consommations d'exergie des procédés unitaires pour la deuxième réduction et élimination des procédés unitaires les moins performants

La procédure de calcul est la même que celle utilisée lors de la première réduction (paragraphe 6.1.2), les valeurs des rendements exergetiques sont indiquées sur le tableau 6.3, les valeurs des paramètres des consommations d'exergie primaire et transformée sont indiquées sur les tableaux 6.4.a et 6.4.b.

Tableau 6.3 : valeurs numériques du rendement exergetique des différents procédés unitaires pour la deuxième réduction

Procédés unitaires	Rendement Exergetique en %
B6-a1	62
B6-a2	64,6
B6-b1	57,49
B6-b2	64

Tableau 6.4.a : Spécification des paramètres exergetiques des procédés unitaires concurrents : consommations et fractions d'exergie primaire et transformée pour la deuxième réduction.

Procédés unitaires	$B_p \times 10^{-6}$ (kJ /hr)	$B_t \times 10^{-6}$ (kJ/hr)	η_{ex}	λ_p	λ_u
B6-a1	0,115	3,14	0,62	$9,39 \times 10^{-5}$	0,0026
B6-a2	0	0,046	0,646	0	$3,75 \times 10^{-5}$
B6-b1	0,022	0,025	0,575	$1,81 \times 10^{-5}$	$2,02 \times 10^{-5}$
B6-b2	0	0,046	0,64	0	$3,75 \times 10^{-5}$

Tableau 6.4.b : Spécification des paramètres exergetiques des procédés unitaires concurrents : surfaces positive, négative et nette pour la deuxième réduction.

Procédés unitaires	Surface positive $(\eta_{ex} \cdot \lambda_p)$	Surface négative $(1 - \eta_{ex}) \cdot \lambda_u$	Surface nette
B6-a1	$5,82 \times 10^{-5}$	-0,00098	$-9,2 \times 10^{-4}$
B6-a2	0	$-1,3 \times 10^{-5}$	$-1,3 \times 10^{-5}$
B6-b1	$1,04 \times 10^{-5}$	$-8,6 \times 10^{-6}$	$1,82 \times 10^{-6}$
B6-b2	0	$-1,4 \times 10^{-5}$	$-1,4 \times 10^{-5}$

On obtient alors S_{nette} (B6-a) = $-93,3 \times 10^{-5}$ et S_{nette} (B6-b) = $-1,218 \times 10^{-5}$, l'alternative B6-a (stabilisation par une colonne, séparation du benzène par une colonne et séparation du toluène par une colonne) est éliminée puisqu'elle présente une plus faible surface nette.

6.3.3 Analyse des charges exergetiques pour la deuxième réduction

La surface nette de B6-b2 ($-1,4 \times 10^{-5}$) est légèrement plus négative que celle de B6-a2 ($-1,3 \times 10^{-5}$), cependant l'écart entre les surfaces nettes de B6-b1 ($18,2 \times 10^{-5}$) et de B6-a1 (-92×10^{-5}) est très significative. Le rendement exergetique de B6-a1 (62 %) est plus élevé que celui de B6-b1 (57,5 %) et il consomme plus d'exergie primaire dû au rejet d'hydrogène. A ce niveau de l'analyse, l'alternative B6-a1 est nettement plus avantageux. Mais la pénalité se situe au niveau de la consommation d'exergie transformée. La perte de charge entre les colonnes de stabilisation et de benzène entraîne une importante consommation d'exergie transformée, alors que pour l'alternative B6-a1 le flash et la colonne de benzène sont à la même pression. De plus les rejets au stabilisateur ne sont pas présents dans le cas du flash, ils sont transférés vers la colonne d'absorption, ce qui contribue également à réduire la quantité d'exergie transformée consommée.

6. 4 Graphe des alternatives restantes après la deuxième réduction

L'élimination des alternatives B6-a1 et B6-a2 réduit le nombre de structures topologiques à 2, les alternatives restantes sont indiquées sur la figure 6.6.

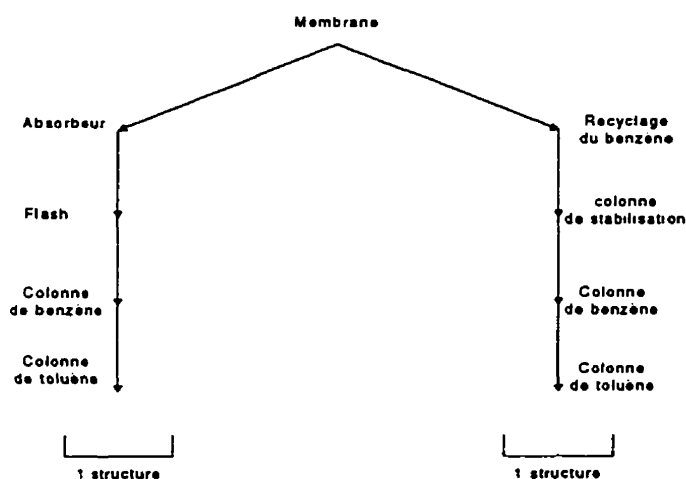


Figure 6.6 : 2 structures topologiques restantes après la 2eme réduction

6.5 Troisième réduction : 2 structures topologiques en compétition, 1 bloc

A ce stade, il reste deux alternatives topologiques constituées par des procédés unitaires appartenant à différents groupes mais conséquents, ils sont regroupées dans un seul bloc qui est illustré à la figure 6.7.

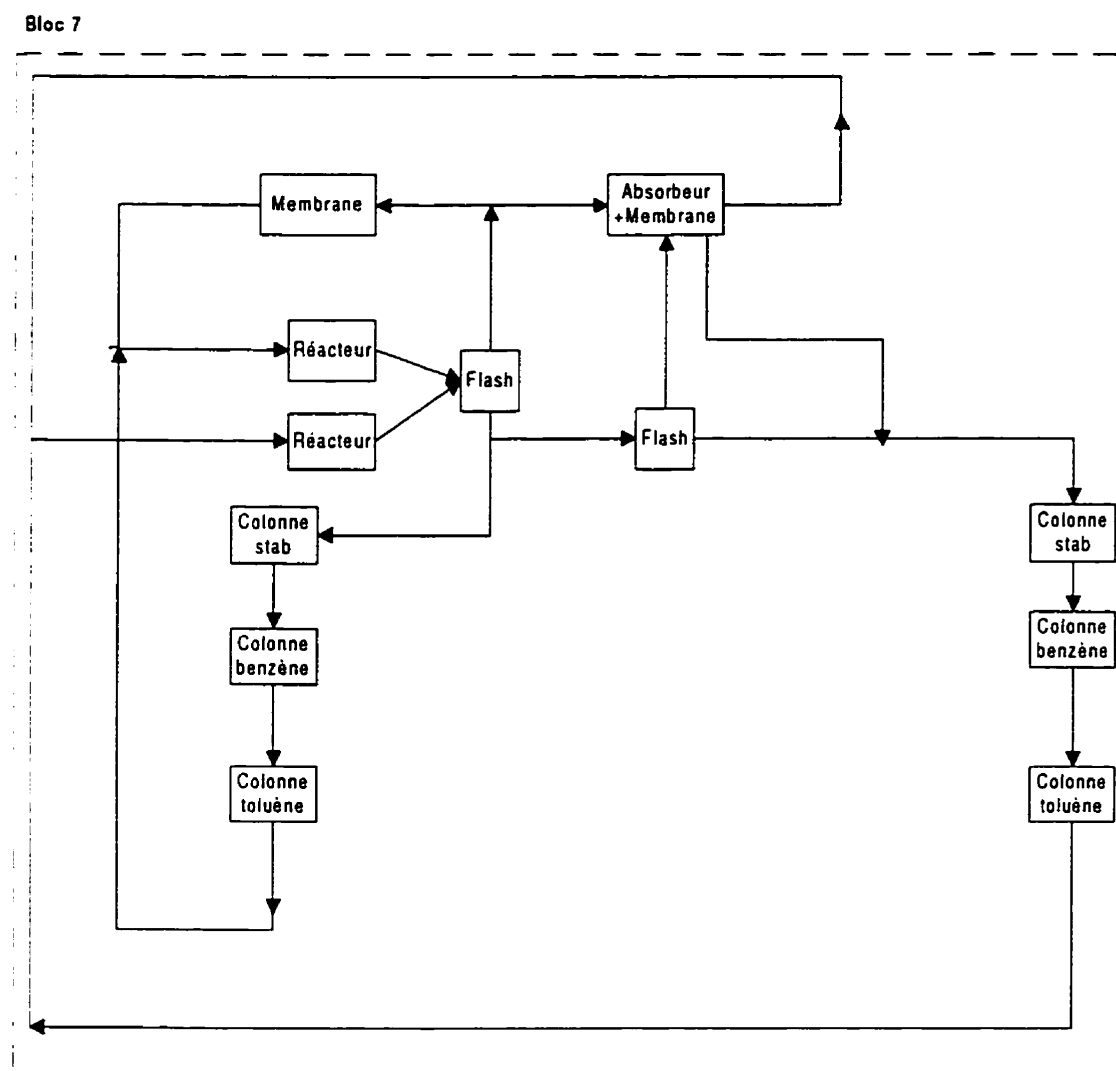


Figure 6.7 : 1 bloc pour la 3eme réduction

6.5.1 Alternatives de procédés unitaires en compétition au niveau du bloc pour la troisième réduction

Le bloc 7 identifié pour la troisième réduction contient les alternatives suivantes divisées chacune en quatre composantes.

B7-a) 1ere alternative :

B7-a1) réacteur avec du benzène recyclé à l'entrée,

B7-a2) recyclage direct du gaz avec récupération de l'hydrogène par la membrane,

B7-a3) stabilisation par colonne, colonne de benzène et colonne de toluène.

B7-b) 2eme alternative :

B7-b1) réacteur sans recyclage de benzène,

B7-b2) recyclage du gaz avec récupération de l'hydrogène par la membrane et
récupération du benzène par l'absorbeur,

B7-b3) stabilisation par flash, colonne de benzène et colonne de toluène.

La superstructure à «procédés concurrents» est maintenant réduite à la combinaison de ces deux alternatives, elle est indiquée à l'annexe 11.

6.5.2 Simulation de la superstructure à «procédés concurrents » réduite après la première et la deuxième réduction

La réduction de la superstructure nécessite un réajustement des débits de matières premières pour respecter les spécifications de la production. Dans ce cas également, les valeurs sont déterminées en considérant les bilans de matière et en tenant compte de la réduction du nombre de subdivisions. Les débits de matières premières sont indiqués sur les tableaux 6.5 et 6.6

Tableau 6.5 : Débits d'hydrogène frais pour la simulation de la superstructure à «procédés concurrents» réduite après la première et la deuxième réduction

Alternatives	Débits molaires d'hydrogène (kmol /hr)
Récupération de l'hydrogène Et recyclage du benzène	142,5
Récupération de l'hydrogène Et du benzène	137,97

Tableau 6.6 : Débits de toluène frais pour la simulation de la superstructure à «procédés concurrents» réduite après la première et la deuxième réduction

Alternatives	Débits molaires de toluène frais (kmol / hr)
Stabilisation par flash	131,07 11,66 (à l'absorbeur)
Stabilisation par colonne	142,27

6.5.3 Calcul des rendements exergetiques et des consommations d'exergie des procédés unitaires pour la troisième réduction

On applique la même procédure utilisée pour la première réduction, pour calculer les rendements et les charges exergetiques. Les valeurs des rendements exergetiques sont indiquées sur le tableau 6.7, les valeurs des paramètres des consommations d'exergie primaire et transformée sont indiquées sur les tableaux 6.8.a et 6.8.b.

Tableau 6.7 : valeurs numériques du rendement exergetique des différents procédés unitaires pour la troisième réduction

Procédés unitaires	Rendement Exergetique en %
B7-a1	0,962
B7-a2	0,034
B7-a3	0,62
B7-b1	0,963
B7-b2	0,083
B7-b3	0,565

Tableau 6.8.a : Spécification des paramètres exergetiques des procédés unitaires concurrents : consommations et fractions d'exergie primaire et transformée pour la troisième réduction.

Procédés unitaires	$B_p \times 10^{-6}$ (kJ /hr)	$B_r \times 10^{-6}$ (kJ/hr)	η_{ex}	λ_p	λ_t
B7-a1	630	15,6	0,962	0,4927	0,012
B7-a2	10,1	150	0,034	$7,88 \times 10^{-3}$	0,117
B7-a3	0,28	1,83	0,62	$2,16 \times 10^{-4}$	0,003
B7-b1	631	15,3	0,963	0,493	0,0119
B7-b2	7,95	73,9	0,083	$6,62 \times 10^{-3}$	0,058
B7-b3	0,026	0,24	0,565	$2,05 \times 10^{-5}$	$1,39 \times 10^{-4}$

Tableau 6.8.b : Spécification des paramètres exergetiques des procédés unitaires concurrents : surfaces positive, négative et nette pour la troisième réduction.

Procédés unitaires	Surface positive ($\eta_a \cdot \lambda_{p_i}$)	Surface négative ($(1-\eta_a) \cdot \lambda_u$)	Surface nette
B7-a1	0,474	$-4,6 \times 10^{-4}$	0,4737
B7-a2	$2,7 \times 10^{-4}$	-0,113	-0,113
B7-a3	$1,3 \times 10^{-4}$	$-5,44 \times 10^{-4}$	$-4,1 \times 10^{-4}$
B7-b1	0,475	$-4,48 \times 10^{-4}$	0,4744
B7-b2	$5,12 \times 10^{-4}$	-0,052	-0,052
B7-b3	$1,16 \times 10^{-5}$	$-6,07 \times 10^{-5}$	$-4,91 \times 10^{-5}$

6.5.4 Choix de la topologie finale

Comme établi précédemment, le choix de la topologie est basée sur la valeur des surfaces nettes, qui sont déterminées en faisant le cumul des surfaces des procédés unitaires constituant les deux alternatives identifiées à la section 6.5.1.

$S_{nette} (B7-a) = 0,36$, et

$S_{nette} (B7-b) = 0,422$.

$S_{nette} (B7-a) > S_{nette} (B7-b)$ on choisit alors comme structure celle combinant l'absorbeur pour récupérer le benzène et l'utilisation d'un flash comme stabilisateur.

6.5.5 Analyse des charges pour la troisième réduction

Alternatives B7-a1 et B7-a2 : l'alternative B7-a1 (système de réaction avec recyclage du benzène) a un effet positif légèrement plus faible (0,4737) sur le rendement global que

l'alternative B7-a2 (système de réaction sans recyclage du benzène) dont la surface nette s'élève à 0,474. L'écart s'explique par la dilution par le benzène des matières premières fraîches et recyclées, qui se traduit par une consommation supplémentaire d'exergie chimique.

Alternatives B7-a2 et B7-b2 : L'alternative B7-a2 (récupération de l'hydrogène par la membrane et recyclage du benzène) consomme plus d'exergie primaire et transformée, mais à un rendement plus faible que l'alternative B7-b2 (récupération de l'hydrogène par la membrane et du benzène par l'absorbeur). La pénalité sur l'alternative B7-a2 est située au niveau des pertes de benzène par rejet. Pour récupérer le benzène, on utilise un absorbeur, ce qui occasionne une consommation supplémentaire d'exergie primaire au niveau de la pompe de toluène. Globalement l'alternative B7-a2 a un impact plus positif.

Alternatives B7-a3 et B7-b3 : l'alternative B7-a3 a un rendement plus élevé et consomme plus d'exergie primaire, ceci l'avantage. Mais il consomme plus d'exergie primaire dû à la chute de pression entre la colonne de stabilisation et la colonne de benzène, mais aussi aux pertes par rejets au niveau de l'absorbeur. Par contre au niveau de l'alternative B7-b3, le flash et la colonne de benzène sont à la même pression, de plus il y a pas de rejets, les produits étant acheminés vers l'absorbeur. Le transfert des rejets vers l'absorbeur améliore l'impact du flash sur le rendement global. Bien que ces rejets vont diminuer les performances de l'absorbeur l'impact global est positif pour le couple flash - absorbeur.

6.6 Amélioration de la solution finale par relocalisation de l'absorbeur

L'un des avantages de la méthode proposée est de pouvoir déterminer les causes de contre performance énergétique de chaque procédé unitaire au niveau des alternatives. L'analyse des charges au cours des réductions successives permet de constater que les

procédés unitaires du groupe purge et recyclage du gaz possèdent les surfaces les plus négatives. La figure 6.8 montre la configuration des procédés unitaires de ce groupe.

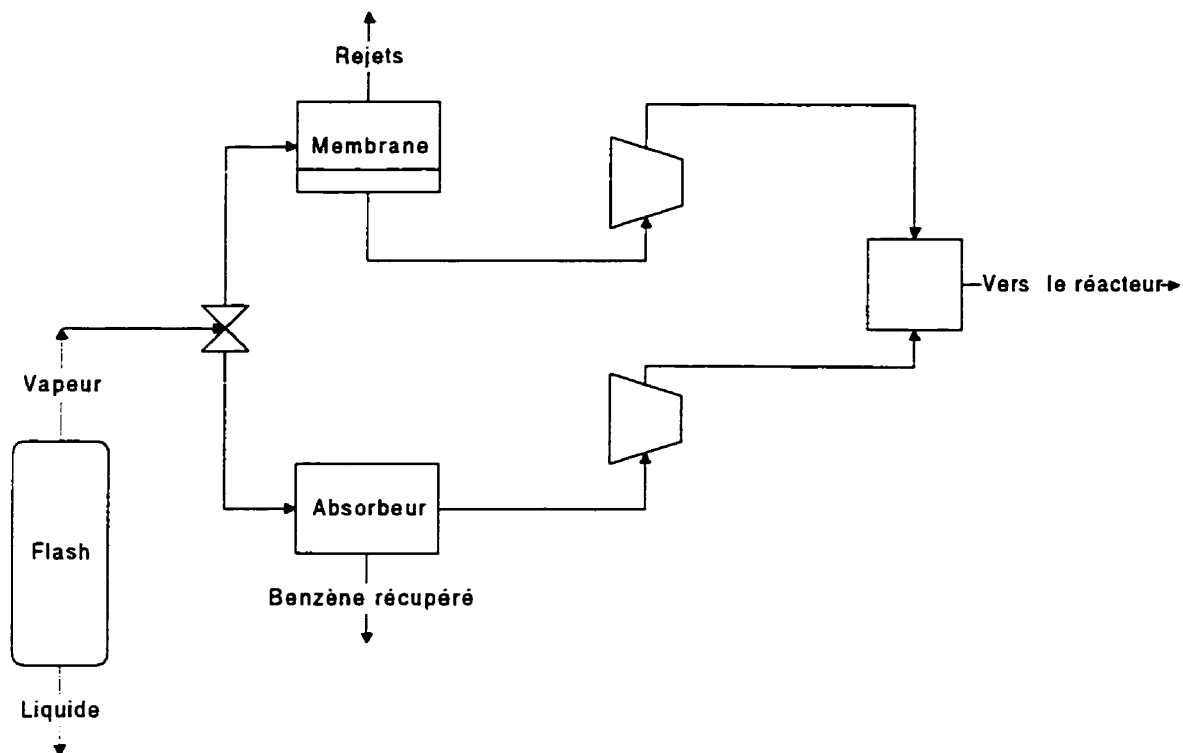


Figure 6.8 : Configuration de la membrane et de l'absorbeur dans la structure optimale.

Le tableau 6.9 résume les valeurs et les causes des consommations exergétiques au niveau du groupe purge et recyclage du gaz.

Tableau 6.9 : Sommaire des consommations d'exergie du groupe purge et recyclage du gaz dans la structure optimale (récupération de l'hydrogène par la membrane et récupération du benzène par l'absorbeur).

Description de la nature de la consommation	exergie primaire consommée $\times 10^{-6}$ (kmol /hr)	Exergie transformée consommée $\times 10^{-6}$ (kmol /hr)
Rejet à la purge	0,543	68,41
Détente à travers la membrane	0	2,349
Pompage et compression	7,35	0
Dilution	0,0513	3,512

Pour déterminer l'impact relatif de chaque équipement (membrane et absorbeur) sur l'efficacité thermodynamique global du bloc, on détermine les charges individuelles de la membrane et de l'absorbeur. Le tableau 6.10 indique les valeurs numériques, le diagramme des charges est représenté par la figure 6.9.

Tableau 6.10 : Rendements et consommations exergétiques de l'absorbeur et de la membrane

	Rendement exergétique	Exergie primaire consommée $\times 10^{-6}$ (kJ/hr)	Exergie transformée Consommée $\times 10^{-6}$ (kJ/hr)
Absorbeur	99,38 %	0,0123	0
Membrane	2,36%	6,688	70,76

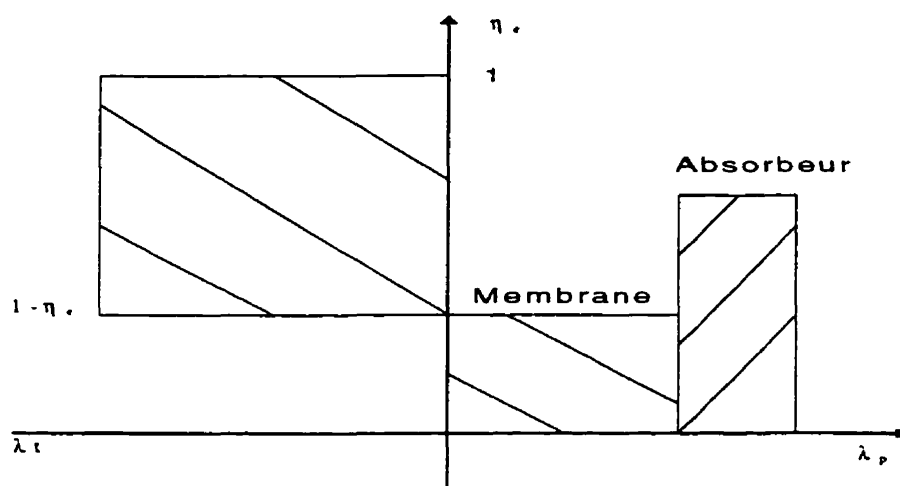


Figure 6.9 : Diagrammes des charges de la membrane et de l'absorbeur.

Le rendement exergetique de l'absorbeur est élevé et il ne consomme pas d'exergie transformée, contrairement à la membrane qui a un rendement faible et consomme de l'exergie transformée dû surtout à la grande perte de pression (exergie thermomécanique) et aux rejets (exergie chimique). En se basant sur le principe de la redistribution des charges (section, 3.3.3) pour augmenter le rendement global, on redistribue les charges exergetiques de la membrane sur l'absorbeur comme illustré sur la figure suivante :

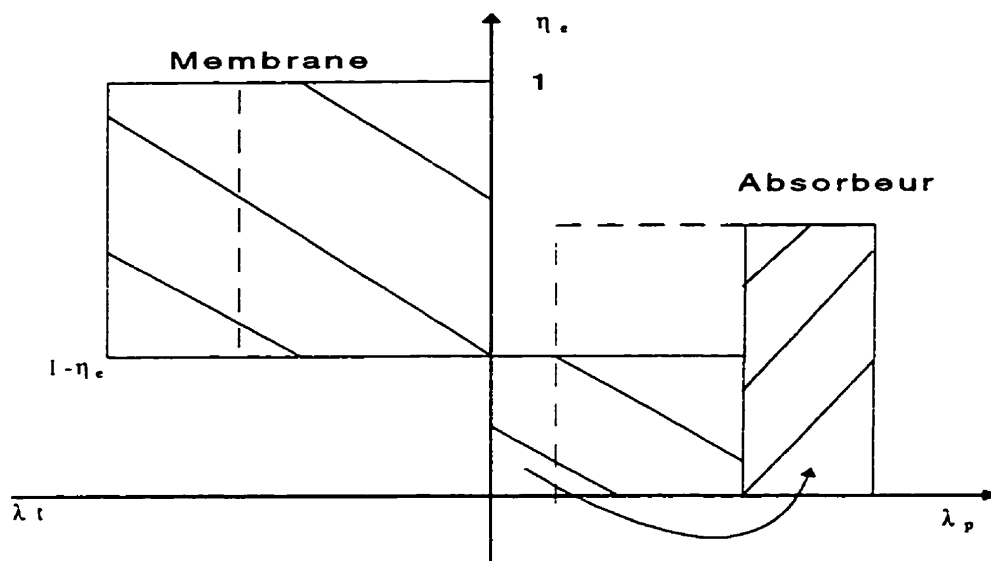


Figure 6.10 : redistribution des charges de la membrane sur l'absorbeur.

La redistribution des charges de la membrane sur l'absorbeur permet alors :

- 1) la réduction de la quantité de benzène rejetée à la membrane, et
- 2) l'augmentation du débit de gaz à l'absorbeur.

(1) entraîne une réduction de la consommation d'exergie transformée par la membrane qui on le rappelle à un rendement plus faible, ceci diminue alors l'effet négatif sur le rendement global. (2) entraîne une augmentation du débit de toluène frais à l'absorbeur. Ceci a pour conséquence d'accroître la consommation d'exergie primaire au niveau de la colonne d'absorption qui a un rendement plus élevé, entraînant ainsi un accroissement de l'effet positif sur le rendement global.

Pour réaliser cette redistribution des charges, on déplace l'absorbeur à la sortie du flash de séparation des phases. Ainsi tout le benzène est récupéré, mais les quantités de méthane, d'hydrogène et de toluène acheminées vers la membrane reste constante. La figure 6.11 montre la nouvelle position de la l'absorbeur.

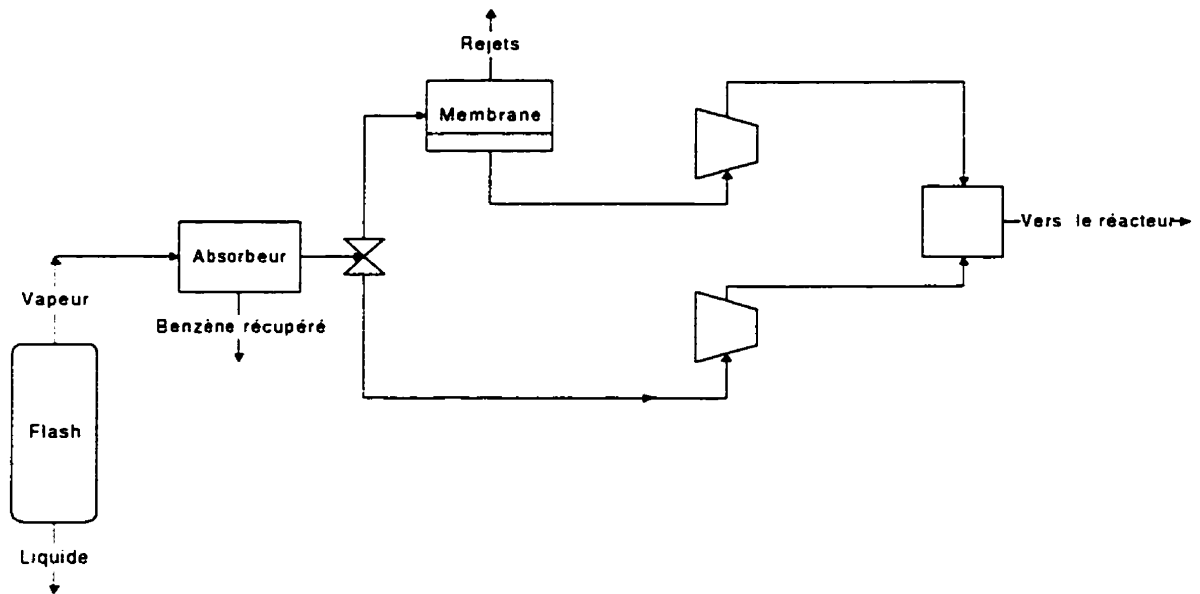


Figure 6.11 : Nouvelle position de l'absorbeur.

6.6.1 Analyse des effets de la relocalisation de l'absorbeur sur le système de séparation

Le déplacement de l'absorbeur entraîne un réajustement de la répartition de la quantité de toluène frais alimentant le système, on rappelle qu'une partie entre par l'absorbeur. Mais la quantité totale pour produire les 265 kmol/hr de benzène reste constante.

L'accroissement de la quantité de benzène provenant de l'absorbeur entraîne également un réajustement au niveau de la quantité venant du flash F1, via le réacteur. Cependant le débit de matières arrivant au système de séparation reste constant pour une même production de benzène. Le rendement et les charges exergétiques du système de séparation restent alors constants.

6.7 Simulation de la solution finale

Les valeurs initiales des débits de matières premières sont celles obtenues par le bilan de matière basé sur l'alternative qui utilise une récupération du benzène et de l'hydrogène.

Contraintes : deux contraintes sont introduites pour respecter la quantité de benzène à produire et le rapport du débit molaire d'hydrogène sur les aromatiques à l'entrée du réacteur. Pour la première contrainte, la variable manipulée est le débit molaire de toluène frais à l'entrée du procédé. Pour la deuxième contrainte, la variable manipulée est la quantité d'hydrogène frais. Ces contraintes sont spécifiées à l'aide de la fonction "*DESIGN SPEC*" définie dans *ASPEN*.

Schéma d'écoulement et résultats

Le schéma d'écoulement est indiqué sur la figure 6.12, le fichier de résultat est indiqué à l'annexe 11.

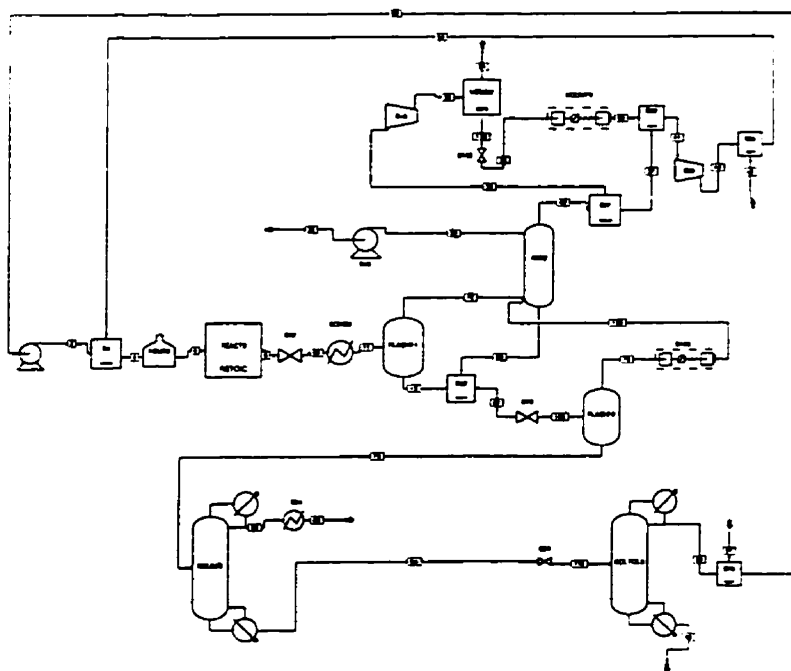


Figure 6.12 Schéma d'écoulement de la solution finale.

6.8 Rendement exergetique de la solution finale

Le tableau 6.11 donne les valeurs numériques des composants du rendement exergetique.

Tableau 6.11 : Composant du rendement exergetique de la solution finale

	Thermomécanique	Chimique	Total
Exergie à l'entrée (kj/hr)	$9,53 \times 10^7$	$1,17 \times 10^9$	$1,26 \times 10^9$
Exergie à la sortie (kj/hr)	$7,57 \times 10^7$	$9,06 \times 10^8$	$9,82 \times 10^8$
Exergie en transit (kj/hr)	7730,7	$2,09 \times 10^6$	$2,17 \times 10^6$

Le rendement exergetique de la solution finale est de 77,65 %

6.9 Détermination des cibles pour le réseau d'échangeurs de chaleur

La dernière étape de la synthèse du procédé concerne la conception du réseau d'échangeurs de chaleur. Dans ce travail on indique seulement les cibles concernant la quantité minimale de puissance calorifique et la quantité minimale de puissance frigorifique. La méthode du pincement est utilisée, en effet elle est reconnue comme une des plus performantes pour la conception des réseaux d'échangeurs de chaleur, par intégration des procédés.

C'est une méthode introduite par «Linnhoff *et al.*, 1982; Linnhoff et Hindmarsh, 1983; Linnhoff et Ahmad, 1986». La détermination des cibles suppose une intégration au niveau de la récupération de la chaleur entre les différents courants de matières du procédé. Les courants chauds étant utilisés pour satisfaire la demande en chaleur des courants froids et vis versa. L'excédent de chaleur est évacué par une source externe de froid (puissance minimale frigorifique), de la même façon, le supplément des besoins en chaleur des courants froids est satisfait par une source externe (puissance minimale calorifique). La détermination des puissances minimales est initialement basée sur une méthode graphique par une représentation sur un diagramme température versus enthalpie des courants du procédé, les courbes obtenues sont appelées composites chaudes et froides, le point de température minimale entre les deux courbes est dénommé point de pincement. Une méthode dite «méthode des tables » est par la suite proposée «Linnhoff *et al.*, 1982; Smith, 1995» elle permet d'obtenir les mêmes résultats avec l'intérêt d'éviter la construction graphique.

Les différents courants du procédé sont indiqués sur le tableau 6.12, on y indique la nature des courants, les plages de températures, les variations totales d'enthalpie ainsi que les chaleurs spécifiques totales à pression constante. On remarque que la variation de température au niveau des rebouilleurs et condenseurs est fixée fictivement à 1°C comme suggérée par «Douglas, 1988», ceci dans le but de pouvoir déterminer une valeur de la chaleur spécifique totale.

Tableau 6.12 : Caractéristiques thermiques des courants de matières

Courants	Numéros	Types	Température initiale (°C)	Température cible (°C)	Variation d'enthalpie MW
Entrée du four de préchauffage	1	Froid	59	621,1	28,63
Condenseur à la sortie du réacteur	2	chaud	690,7	37,8	-32,27
Condenseur de la colonne de benzène	3	chaud	64,7	53,5	- 5,43
Rebouilleur de la colonne de benzène	4	froid	146,63	147,63	6,28
Refroidisseur du benzène	5	chaud	63,7	25	- 3,73
Condenseur de la colonne de toluène	6	chaud	113,3	112,3	- 1,047
Rebouilleur de la colonne de toluène	7	froid	253	254	0,89
1 ^{er} étage du compresseur	8	chaud	411,23	49	- 1,39
2 ^{ème} étage du compresseur	9	chaud	364,62	49	- 1,24

Les puissances requises sont déterminées pour une valeur minimale de l'écart de température (ΔT_{min}) entre les différents échangeurs de chaleur. La détermination de cette valeur fait appelle à un calcul d'optimisation en considérant les coûts de l'énergie et de l'investissement initial qui est fonction de la surface globale d'échange. En effet la surface d'échange varie inversement par rapport à ΔT_{min} , alors que les quantités d'énergie externes varient dans le même sens. En disposant des fonctions économiques de l'investissement en fonction de la surface et des coûts de l'énergie, on détermine la valeur optimale de ΔT_{min} , cette procédure est bien décrite dans «Linnoff et Ahmad, 1986».

Dans notre cas on prend la valeur standard suggérée de $10\text{ }^{\circ}\text{C}$ qui est aussi la température au pincement.

En utilisant la méthode des tableaux décrits plus haut, on détermine les puissances calorifiques et frigorifiques, QH et QC .

$$QH = 26,37 \text{ MW}$$

$$QC = 0,15 \text{ MW}$$

CHAPITRE 7

ÉVALUATION DE L'APPROCHE PAR RAPPORT À L'APPROCHE HIÉRARCHIQUE ET L'APPROCHE MATHÉMATIQUE

L'approche qu'on a proposée pour la synthèse du procédé de fabrication de benzène est basée sur une analyse thermodynamique, elle se distingue des méthodes thermodynamiques connues en deux points :

- 1) l'analyse est basée sur une superstructure, et
- 2) les alternatives sont comparées simultanément en utilisant la méthode de redistribution des charges et en évaluant l'impact de chaque sous procédé sur le rendement global ainsi que leurs interactions entre eux.

L'utilisation de la superstructure assure que toutes les possibilités logiques ont été examinées et comparées, ceci est une condition nécessaire pour atteindre l'optimum.

La méthode de redistribution des charges permet de comprendre les causes de dégradation énergétique liées à chaque option. Elle permet également de déterminer l'impact de chaque sous procédé sur le rendement global mais aussi l'interaction des sous procédés entre eux. Ces aspects permettent au concepteur de faire des choix objectifs tout en gardant le contrôle du design, en outre il dispose des solutions non optimales mais réalistes.

Cependant, dans notre approche on ne tient pas compte du coût du capital, ainsi à la fin du design le concepteur doit évaluer le potentiel économique pour s'assurer de la rentabilité du projet.

7.1 Évaluation de l'approche par rapport à l'approche hiérarchique

Dans l'approche hiérarchique, les paramètres de fonctionnement sont fixés en se basant sur des méthodes heuristiques, on a la même démarche.

Dans l'approche hiérarchique, le choix de la structure du procédé est séquentiel, ceci ne permet pas d'étudier les interactions entre les différentes parties. Dans notre approche les charges exergetiques et les surfaces nettes permettent d'évaluer les sous procédés et de déterminer leurs impacts sur le rendement global.

Le procédé de fabrication de benzène a été également synthétisé en utilisant l'approche hiérarchique «Douglas, 1985; Douglas, 1988». La solution obtenue est illustrée par la figure 7.1, elle se résume ainsi :

- purge du gaz et recyclage direct,
- utilisation d'une colonne pour la stabilisation,
- utilisation d'une colonne pour la séparation du benzène, et
- utilisation d'une colonne pour la séparation du toluène.

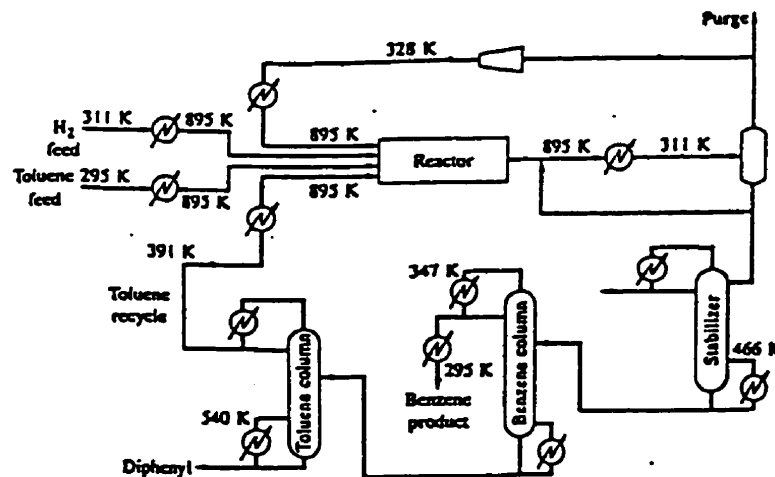


Figure 7.1: Schéma d'écoulement obtenu avec l'approche hiérarchique
(tiré de Douglas, 1988)

La différence avec la solution trouvée par notre approche se situe au niveau du recyclage du gaz et de la stabilisation. On utilise un flash pour la stabilisation, bien que qu'il a un rendement exergetique plus faible qu'une colonne, mais il consomme moins d'exergie transformée. Le couple flash-absorbeur est plus performant que le couple colonne-absorbeur (voir section 6.3.3). Dans l'approche hiérarchique il n'est pas possible d'étudier l'interaction entre les systèmes de recyclage du gaz (absorbeur) et de séparation du liquide (flash ou colonne), d'où l'élimination des alternatives dont les performances sont fonction de l'interaction entre les deux systèmes.

7.2 Évaluation de l'approche par rapport à l'approche mathématique

Dans l'approche mathématique le concepteur n'interagit pas avec le design une fois que le problème est modélisé. Il obtient également une solution optimale unique choisie sur une base économique, le concepteur ne dispose pas d'information sur les défauts des alternatives éliminées.

La synthèse du procédé a été également effectuée par l'approche mathématique «Kocis et Grossmann, 1989», la figure 7.2 illustre la solution optimale qui se résume ainsi :

- a) utilisation d'une membrane à la purge pour récupérer l'hydrogène,
- b) utilisation d'une colonne pour la stabilisation,
- c) utilisation d'une colonne pour la séparation du benzène, et
- d) utilisation d'une colonne pour la séparation du toluène.

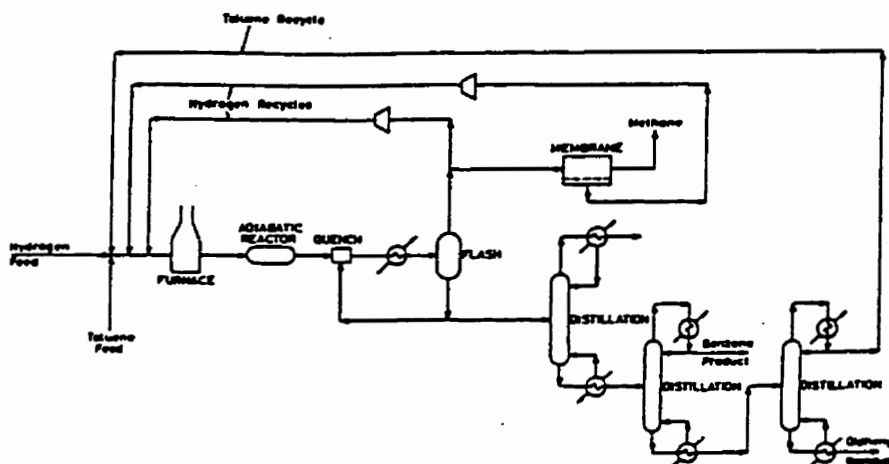


Figure 7.2 : Schéma d'écoulement obtenu par l'approche mathématique
(tiré de Smith, 1995)

La différence majeure avec notre solution est l'utilisation de l'absorbeur couplée avec un flash comme stabilisateur dans notre cas. La solution trouvée par notre approche suppose également une relocalisation de l'absorbeur par rapport à sa position initiale dans la superstructure. Avec l'approche mathématique la superstructure est certes réductible mais la position des procédés unitaires reste figée. En utilisant la méthode de redistribution de charges, on a pu déterminer la position optimale de l'absorbeur d'un point de vue du rendement exergetique, en effet on dispose de l'information sur les performances thermodynamiques de l'absorbeur, qui dans ce cas sont excellentes (voir paragraphe 6.4).

Avec l'approche mathématique, les paramètres opératoires des procédés unitaires sont optimisés sur une base financière, dans notre cas, elles sont fixées au début du design en

se basant sur des méthodes heuristiques. Les méthodes heuristiques sont déterminées sur une base expérimentale proposant des paramètres opératoires proches de l'optimum économique.

Dans notre approche, le réseau d'échangeurs de chaleur est conçu une fois que la structure topologique du procédé est déterminée. Avec l'approche mathématique, le réseau d'échangeurs de chaleur peut être considéré dans la modélisation.

7.3 Comparaison des résultats de la synthèse du benzène par les approches hiérarchique, mathématique et l'approche proposée

Les résultats comparés concernent les consommations de matières premières, les débits de rejets, les consommations énergétique et enfin les rendements exergetiques. Également on discute des profits annuels sur la base des données disponibles.

Pour déterminer les différents paramètres de comparaison on effectue une simulation de chacune des solutions en imposant les mêmes contraintes à savoir la quantité de benzène produite et un même rapport hydrogène sur aromatique à l'entrée du procédé qui est égale à 5. Cependant pour la solution obtenue par l'approche mathématique on ne dispose pas des valeurs des paramètres opératoires, par conséquent on les prend égaux à ceux obtenus par l'approche qu'on a proposée.

7.3.1 Comparaison des consommations de matières premières et des débits de rejets

Le tableau 7.1 illustre les valeurs des débits de matières premières et des débits de rejets.

Tableau 7.1 : débits de matières premières et de rejets pour les différentes solutions

	Débit molaire d'hydrogène frais (kmol / hr)	Débits molaire de toluène frais (kmol / hr)	Débits de rejets (kmol /hr)
Solution par l'approche hiérarchique	748,98	279,49	482,29
Solution par l'approche mathématique	277,714	280,08	558,39
Solution par l'approche proposée	269,6	276,25	293,89

L'approche qu'on a proposée entraîne moins de consommation en matières premières, cela est dû à l'utilisation de l'absorbeur pour récupérer le benzène. La récupération du benzène permet de réduire la quantité de toluène qui réagit, mais également de diminuer la quantité d'hydrogène tout en gardant un rapport de 5 entre le débit d'hydrogène sur les aromatiques comme spécifié.

L'approche proposée produit moins de rejets, cela est dû à la récupération de l'hydrogène à la membrane, du benzène à l'absorbeur mais également à la récupération des produits au niveau de la stabilisation par flash qui sont acheminés vers l'absorbeur.

7.3.2 Comparaison des consommations énergétiques et des rendement exergetiques

Les consommations énergétiques sont décomposées en trois constituant que sont :

a) la consommation d'énergie électrique au niveau des compresseurs, pompes etc,

- b) la consommation d'énergie thermique au niveau du four, des réchauffeurs et des rebouilleurs, et
- c) la consommation d'énergie frigorifique au niveau des condenseurs, entre les étages de compression et des refroidisseurs.

Le tableau 7.2 illustre les valeurs des consommations énergétiques et des rendements exergétiques.

Tableau 7.2 : Consommations énergétiques et rendements exergétiques pour les différentes solutions

	Puissance électrique MW	Puissance thermique MW	Puissance Frigorifique MW	Rendement exergétique %
Solution par l'approche hiérarchique	3,13	33,80	40,63	69,81
Solution par l'approche mathématique	3,46	38,96	44,88	76,61
Solution par l'approche proposée	3,4	35,81	41,4	77,38

La solution obtenue par l'approche hiérarchique consomme moins d'énergie électrique et frigorifique mais nécessite plus d'énergie thermique. Cela est dû au fait qu'elle n'utilise pas de membrane pour récupérer l'hydrogène, par contre elle utilise une colonne de plus

pour la stabilisation ce qui est la cause de l'augmentation de la demande en puissance thermique pour le rebouilleur.

La solution obtenue par l'approche mathématique consomme plus d'énergie électrique, thermique et frigorifique. Le passage du benzène qui n'est pas récupéré par l'absorbeur à travers la membrane augmente la puissance du compresseur multiple à la sortie de la membrane. Également la solution par l'approche mathématique utilise une colonne comme stabilisateur, ce qui est la raison de l'augmentation de la puissance thermique au niveau du rebouilleur et de la puissance frigorifique au niveau du condenseur.

Le rendement exergetique de la solution obtenue est supérieure à ceux obtenus par les approches hiérarchique et mathématique comme prévu, notre approche étant basée sur l'optimisation du rendement exergetique. Le rendement exergetique exprime le degrés de perfection thermodynamique de chaque solution à travers les consommations de matières premières, d'énergie et de production de rejets.

7.3.3 Comparaison des profits annuels

Une évaluation économique a été effectuée par «Kocis et Grossmann, 1989» pour leur solution obtenue par l'approche mathématique. Les profits sont basés sur la vente du benzène, du diphényle, et des produits de la purge. Les coûts incluent les matières premières, les utilités (électricité, vapeur, eau de refroidissement), également les coûts de l'investissement sur la membrane, le réacteur, les colonnes de distillation, les compresseurs et pompes. Dans leur évaluation, ils ont utilisés des modèles linéaires pour tous les deux types de coûts énoncés. En résolvant le modèle mathématique, ils obtiennent un profit annuel de 5887×10^3 US \$ / an. La solution obtenue par l'approche mathématique n'inclut pas le réseau d'échangeurs de chaleur dans sa formulation bien que ceci soit

possible, on suppose alors que les besoins thermiques ou frigorifiques sont satisfaits de façon individuel sans intégration.

Dans leur étude, ils ont également déterminé le profit annuel de la solution obtenue par l'approche hiérarchique qui s'élève à 4814×10^3 US \$ /an .

La variation des coûts par rapport à notre approche en outre des paramètres opératoires (valeurs non disponibles) qui conditionnent les coûts des procédés unitaires, se situe au niveau de l'utilisation de l'absorbeur et d'un flash comme stabilisateur mais aussi au niveau de la consommation d'hydrogène et de toluène. On rappelle cependant que la solution trouvée par l'approche proposée n'est pas incluse dans la superstructure de base, ainsi elle est pas nécessairement inférieure d'un point de vue économique à celle obtenue par l'optimisation mathématique.

CONCLUSION

Ce travail a permis d'élaborer une nouvelle approche pour la synthèse des procédés. La nouvelle approche procède par la réduction d'une superstructure en utilisant l'analyse exergétique basée sur la méthode de redistribution des charges. Les paramètres de fonctionnement sont fixés et on effectue une optimisation structurale avec comme critère la maximisation du rendement exergétique.

L'utilisation d'une superstructure permet au concepteur de considérer plusieurs solutions possibles et d'en faire l'étude simultanément. L'approche proposée permet à l'ingénieur de choisir les procédés unitaires ainsi que leurs paramètres opératoires en utilisant des méthodes heuristiques. Ceci lui permet alors de mettre à contribution ses connaissances et son expérience.

D'autre part la méthode de redistribution des charges permet de déterminer les causes de dégradation énergétique et de pertes de matière premières, ce qui donne la possibilité au concepteur d'avoir le contrôle du procédé. Les informations accumulées lors de la réduction de la superstructure sur les causes de dégradation énergétique et de matières premières peuvent être mises à profit pour accroître le rendement exergétique de la structure optimale découlant de la réduction de la superstructure. L'amélioration du rendement exergétique peut se traduire par une relocalisation des procédés unitaires, ce qui permet ainsi de générer de nouvelles alternatives de structures qui n'étaient pas comprises dans la superstructure initiale.

Dans l'approche qu'on a proposée on ne tient pas compte du coût du capital investi sur les équipements, cet aspect est une caractéristique commune à toutes les approches de synthèse des procédés basées sur la thermodynamique. Ainsi à la fin du design, le concepteur doit vérifier le potentiel économique pour s'assurer de la rentabilité du projet.

L'approche qu'on a proposé peut être améliorée en liant les variables thermodynamiques avec des variables économiques, ceci pourrait permettre alors de tenir compte du coût du capital investi.

Il serait également profitable d'intégrer le réseau d'échangeur de chaleur dans la superstructure à «procédés concurrents», ceci permettrait alors de quantifier les besoins en utilités chaude et froide des différentes structures en compétition. En effet l'interaction du réseau d'échangeur de chaleur avec le reste du procédé peut conduire à une autre topologie optimale.

RÉFÉRENCES

- AHMAD S., LINNHOFF, B., SMITH, R., (1990). *Cost optimum heat exchanger networks-2 , Targets and design for detailed capital cost models*, Comput. Chem. Engng. 14, 751-767.
- ASPEN TECHNOLOGY Inc., *Aspen Plus user guide*, Cambridge MA, 1988
- BAKER, R.W., CUSSLER, E. L., EYKAMP, W., KOROS, W.J., RILEY, R.L., STRATHMANN,H., (1991). *Membrane separation systems, recent developments and future directions*, NOYES data corporation, Park Ridge, New Jersey, U.S.A, p. 189-241.
- BRODYANSKY, V.M., SORIN, M.V., and LE GOFF, P. (1994). *The efficiency of industrial processes: exergy analysis and optimization*. Elsevier.
- DOUGLAS, J.M., (1985). *A hierarchical design procedure for process synthesis*, Aiche J. (Vol.31,No 3), pp. 353-362.
- DOUGLAS, J.M., (1988). *Conceptual design of chemical processes*, McGraw-Hill Company.
- EDGAR, T. F. and HIMMELBLAU, D.M., (1988). *Optimization of chemical processes*. New-York: McGraw-Hill.
- FOGLER, H. S., (1992). *Elements of chemical reaction engineering 2nd ed.*: Englewood Cliffs, New Jersey; PTR, Prentice Hall.
- GROSSMAN, I.E., (1985). *Mixed-integer programming approach for the synthesis of integrated process flowsheets*. Comput.Chem. Engng. Vol 9, pp 463-482

- HENLEY, E.J. and SEADER, J.D., (1981). *Equilibrium-stage separation operations in chemical engineering*, Willey, New-York,.
- KING, J.C., (1981). *Separation processes*, 2nd edition, McGraw-Hill Book Company.
- KOCIS, G.R. and GROSSMANN, I.E., (1988). *Global optimization of nonconvex mixed-integer nonlinear programming (MINLP) problems in process synthesis*, Ind. Eng. Chem. Res. 27, pp 1407-1421.
- KOCIS, G.R., and GROSSMANN, I.E., (1989). *A modelling and decomposition strategy for the MINLP optimization of process flowsheets*, Computers and chemical engineering Vol. 13, No. 7, pp. 797-819.
- KOTAS, T.J., (1995). *The exergy method of thermal plant analysis*, Krieger publishing company, Malabar, Florida.
- LINNHOFF, B., (1982). *User guide in process integration for the efficient use of energy*, The Institution of Chemical Engineers, U.K.
- LINNHOFF, B. and HINDMARSH, E., (1983). *The pinch design method for heat exchanger networks*, Chem. Eng. Sci., 38: pp 745-763.
- LINNHOFF, B. and AHMAD, S., (1986). *Supertargeting or the optimization of heat exchanger networks prior to design*, World congress II, Chemical Engineering, Tokyo.
- MARCO, A. D. and GROSSMANN, I. E., (1986). *An outer-approximation algorithm for a class of mixed integer nonlinear programs*, Mathematical programming North-Holland. Vol 6, pp 307-339,

PAPOULIAS, S.A. and GROSSMANN, I.E., (1983). *A structural optimization approach in process synthesis-III*, Computers and Chemical Engineering, Vol. 7, No. 6, pp. 723-734.

PAPOULIAS, S. and GROSSMANN, I. E., (1983). *A structural optimization approach in process synthesis*, Parts I-III. Comput. Chem. Engng Vol 7, pp 695-734.

PERRY, R.H., GREEN, D.W. and MALONES, J.O., (1984). *Perry's chemical engineer's hanbook*, 6th ed., McGraw-Hill, New York.

SMITH, R. (1995). *Chemical process design*, Mc Graw-Hill, Inc.

SORIN, M.V. and BRODYANSKY, V.M., (1992). *A method for thermodynamic optimization-I. theory and application to an amonia -sysnthesis plant*. Energy, Vol 17, No 11, pp 1019-1031.

SORIN, M.V., and LE GOFF, P (1992). *A method for thermodynamic optimization-II. application to an absorption heat pump and generalization of the method*. Energy, Vol 17, No 11 pp 1033-1048.

SORIN, M.V., BRODYANSKY, V.M. and PARIS J., (1994). *Observations on exergy efficiency coefficients*. Proceedings of the Florence World Energy Research Symposium, Florence Italy, July 6-8, pp. 941-949.

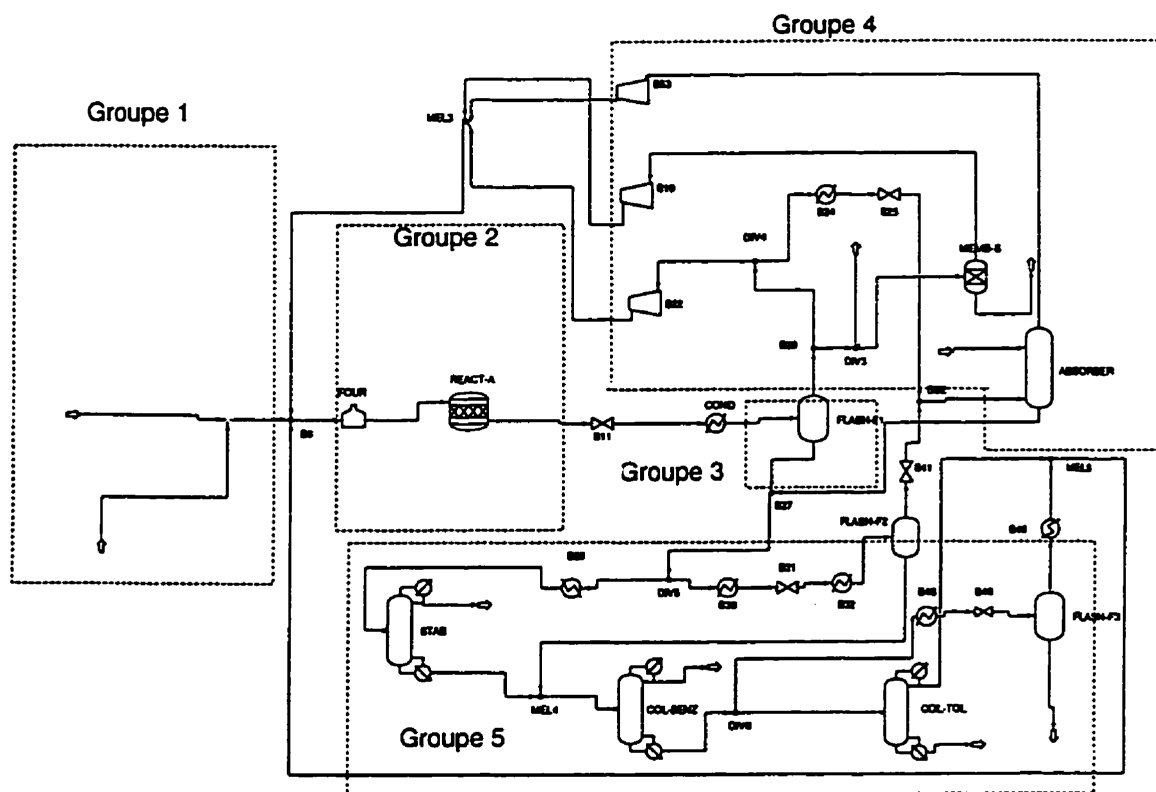
SZARGUT, J.M, DAVID R. and STEWARD, F.R. (1988). *Exergy analysis of thermal, chemical, and metallurgical processes*, Hemisphere: New York.

TOWNSEND, D.W and LINNHOF, B., (1984). *Surface area targets for heat exchanger networks*, IchemE. Annual Res. Mtg, Bath, U.K. 1984.

ANNEXE 1**EXERGIES CHIMIQUES STANDARDS**

Composants	Exergie chimique standard Kj /Kmol
Benzène	3305350
Diphényl	6461330
Hydrogène	238490
Méthane	836510
Toluène	3952550

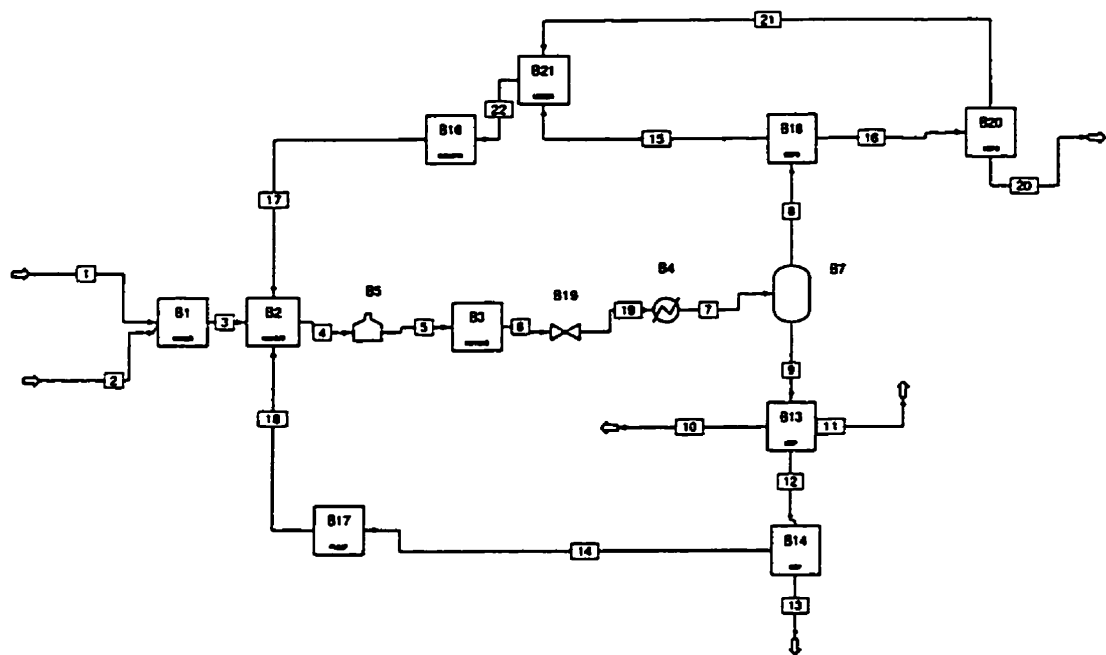
ANNEXE 2

SCHÉMA D'ÉCOULEMENT DE LA SUPERSTRUCTURE DE BASE¹

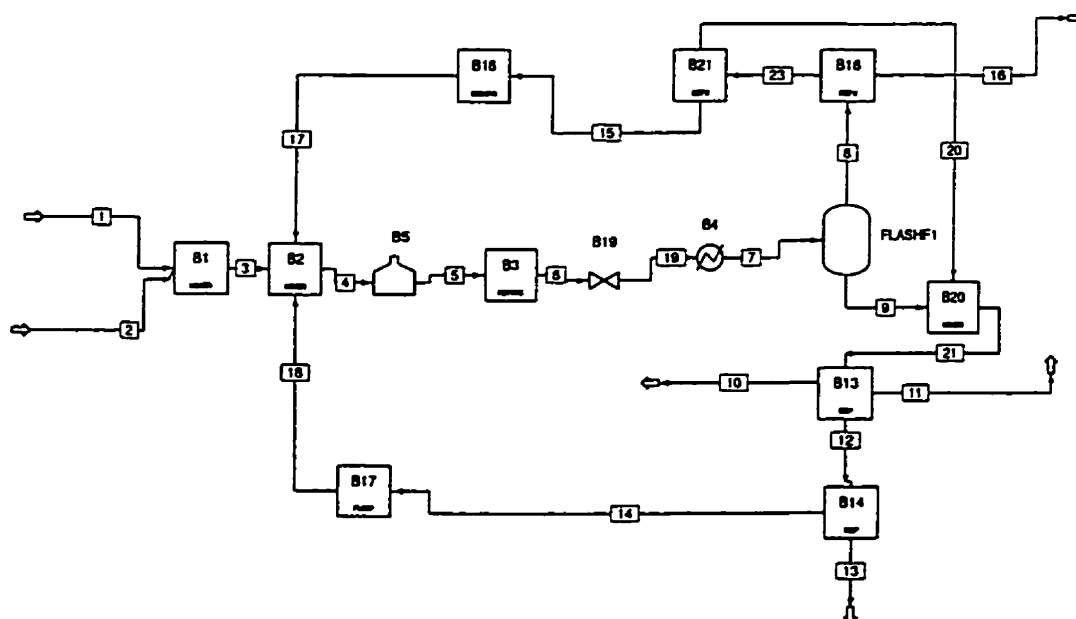
¹ Un schéma avec une échelle plus grande est disponible à la fin du document

ANNEXE 3
VARIANTES DES SCHÉMAS D'ÉCOULEMENT
DE LA SIMULATION DU BILAN DE MATIÈRE

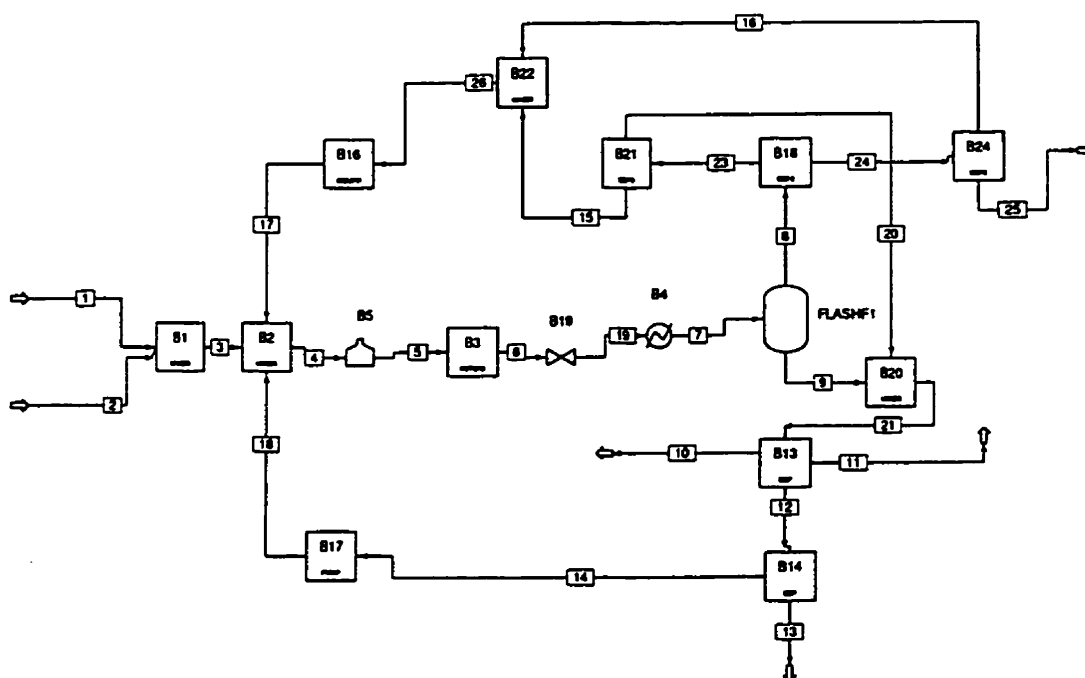
**Schéma d'écoulement pour le bilan de matière, cas de base :
récupération de l'hydrogène par une membrane et recyclage du benzène.**



**Schéma d'écoulement pour le bilan de matière, cas de base :
récupération du benzène par l'absorbeur.**

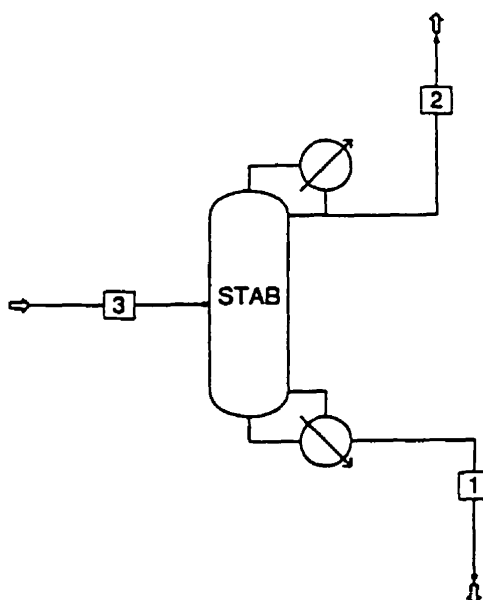


**Schéma d'écoulement pour le bilan de matière, cas de base :
récupération de l'hydrogène par une membrane et du benzène par l'absorbeur.**



ANNEXE 4**RÉSULTATS DES SIMULATIONS PARTIELLES
DES COLONNES DE DISTILLATION**

Résultats de la simulation partielle de la colonne de stabilisation :



 Data file created by ASPEN PLUS Rel. 9.2-1 on 16:30:02 Wed Dec 3, 1997
 Run ID: STAB Item: RUN-STATUS Screen: Run-Status.Main
 C-----C-----C-----C-----C-----C-----

ASPEN PLUS Version: 9.2-1

Title:

Date and Time: AUGUST 18, 1997 4:05:14 P.M.
 Username: diallo
 Host Computer: lynx
 Machine Type: IBM-RISC
 Site ID: ECOLEAIX

Calculations were completed normally

Use >> and << to browse results
 (c) 1995 Aspen Technology, Inc.

 Data file created by ASPEN PLUS Rel. 9.2-1 on 16:29:39 Wed Dec 3, 1997

Run ID: STAB Item: STAB Screen: Dstwu.Results

-----C-----C-----C-----C-----C-----C-----
 Description: Units:

Convergence Status: Block Completed Normally
 Property Status: OK

Minimum Reflux Ratio	5.448202	
Actual Reflux Ratio	6.540000	
Minimum Stages	4.07	
Actual Equilibrium Stages	8.32	
Number of Actual Stages Above Feed	3.30	
Reboiler Heating Required	1.15401E+5	WATT
Condenser Cooling Required	7.89597E+5	WATT
Feed Stage Location	4.30	
Distillate Temperature	51.10294	C
Bottom Temperature	222.7717	C
Distillate Vs Feed	.0318168	
HETP		

(c) 1995 Aspen Technology, Inc.

 Data file created by ASPEN PLUS Rel. 9.2-1 on 16:29:21 Wed Dec 3, 1997

Run ID: STAB Item: STREAM-SUM Screen: Stream-Sum.Main

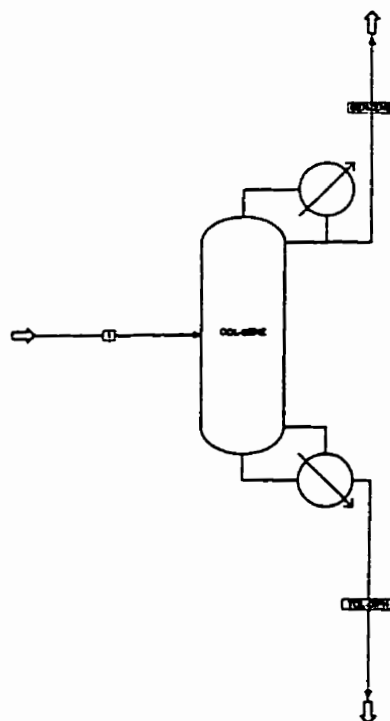
-----C-----C-----C-----C-----C-----C-----

Display STREAMS	3	1	2
Units:	From	STAB	STAB
Format: GEN_E	To	STAB	STAB
	Phas	LIQUID	VAPOR
Temperature [C]	248.2	222.8	51.1
Pressure [BAR]	36.02	17.57	17.23
Vapor Frac	0.031	0.000	1.000
Mole Flow [KMOL/HR]	372.257	360.413	11.844
Mass Flow [KG/HR]	29957.996	29775.221	182.776
Volume Flow [CUM/HR]	61.325	47.047	18.255
Enthalpy [MMBTU/HR]	27.174	25.519	-0.645
Mole Flow [KMOL/HR]			
H2	1.923	trace	1.923
CH4	9.604	0.001	9.603
BENZENE	265.000	264.682	0.318
TOLUENE	91.230	91.230	
DIPHENYL	4.500	4.500	
Mole Frac			

Display STREAMS	3	1	2
Units:	From	STAB	STAB
Format: GEN_E	To	STAB	STAB
	Phas	LIQUID	VAPOR
H2	0.005	3 PPS	0.162
CH4	0.026	3 PPM	0.811
BENZENE	0.712	0.734	0.027
TOLUENE	0.245	0.253	
DIPHENYL	0.012	0.012	

(c) 1995 Aspen Technology, Inc.

R sultats de la simulation partielle de la colonne de benz ne :



 Data file created by ASPEN PLUS Rel. 9.2-1 on 16:27:10 Wed Dec 3, 1997
 Run ID: COL-82 Item: RUN-STATUS Screen: Run-Status.Main
 C-----C-----C-----C-----C-----C-----

ASPEN PLUS Version: 9.2-1

Title:

Date and Time: AUGUST 18, 1997 3:50:34 P.M.

Username: diallo

Host Computer: lynx

Machine Type: IBM-RISC

Site ID: ECOLEAIX

Calculations were completed normally

Use >> and << to browse results
 (c) 1995 Aspen Technology, Inc.

 Data file created by ASPEN PLUS Rel. 9.2-1 on 16:27:29 Wed Dec 3, 1997

Run ID: COL-BZ Item: COL-BENZ Screen: Dstwu.Results

-----C-----C-----C-----C-----C-----C-----
 Description: Units:

Convergence Status: Block Completed Normally
 Property Status: OK

Minimum Reflux Ratio	1.300969	
Actual Reflux Ratio	1.560000	
Minimum Stages	22.7	
Actual Equilibrium Stages	46.2	
Number of Actual Stages Above Feed	28.8	
Reboiler Heating Required	3.60874E+6 WATT	
Condenser Cooling Required	5.60389E+6 WATT	
Feed Stage Location	29.8	
Distillate Temperature	105.7494	C
Bottom Temperature	147.9911	C
Distillate Vs Feed	.7338893	
HETP		

(c) 1995 Aspen Technology, Inc.

 Data file created by ASPEN PLUS Rel. 9.2-1 on 16:26:46 Wed Dec 3, 1997

Run ID: COL-BZ Item: STREAM-SUM Screen: Stream-Sum.Main

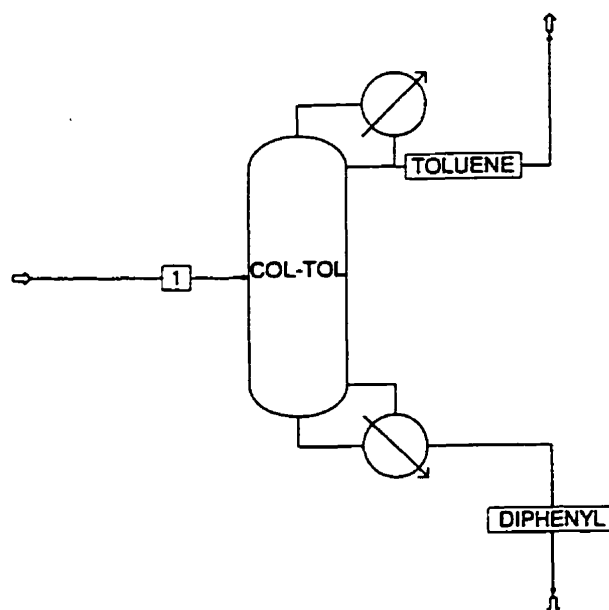
-----C-----C-----C-----C-----C-----C-----

Display STREAMS	1	BENZENE	TOL-DIPH
Units:	From	COL-BENZ	COL-BENZ
Format: GEN_E	To	COL-BENZ	COL-BENZ
	Phas	LIQUID	LIQUID
Temperature [C]		222.8	105.7
Pressure [BAR]		17.57	2.07
Vapor Frac		0.000	0.000
Mole Flow [KMOL/HR]		360.730	264.736
Mass Flow [KG/HR]		29800.045	20679.498
Volume Flow [CUM/HR]		47.086	26.264
Enthalpy [MMBTU/HR]		25.543	15.180
Mole Flow [KMOL/HR]			
H2			
CH4			
BENZENE		265.000	264.735
TOLUENE		91.230	0.001
DIPHENYL		4.500	
Mole Frac			

Display STREAMS	1	BENZENE	TOL-DIPH
Units:	From	COL-BENZ	COL-BENZ
Format: GEN_E	To	COL-BENZ	COL-BENZ
	Phas	LIQUID	LIQUID
H2			
CH4			
BENZENE		0.735	1.000
TOLUENE		0.253	3 PPM
DIPHENYL		0.012	

(c) 1995 Aspen Technology, Inc.

Résultats de la simulation partielle de la colonne de Toluène :



 Data file created by ASPEN PLUS Rel. 9.2-1 on 16:32:29 Wed Dec 3, 1997
 Run ID: COL-TOL Item: RUN-STATUS Screen: Run-Status.Main
 C-----C-----C-----C-----C-----C-----

ASPEN PLUS Version: 9.2-1

Title:

Date and Time: AUGUST 18, 1997 3:45:07 P.M.
 Username: diallo
 Host Computer: lynx
 Machine Type: IBM-RISC
 Site ID: ECOLEAIX

Calculations were completed normally

Use >> and << to browse results
 (c) 1995 Aspen Technology, Inc.

 Data file created by ASPEN PLUS Rel. 9.2-1 on 16:32:55 Wed Dec 3, 1997

Run ID: COL-TOL Item: COL-TOL Screen: Dstwu.Results

C-----C-----C-----C-----C-----C-----
 Description: Units:

Convergence Status: Block Completed Normally
 Property Status: OK

Minimum Reflux Ratio .0324730
 Actual Reflux Ratio .0400000
 Minimum Stages 5.39
 Actual Equilibrium Stages 68.2
 Number of Actual Stages Above Feed 41.1
 Reboiler Heating Required 7.68600E+5 WATT
 Condenser Cooling Required 8.98387E+5 WATT
 Feed Stage Location 42.3
 Distillate Temperature 112.4364 C
 Bottom Temperature 256.6122 C
 Distillate Vs Feed .9520398
 HETP

(c) 1995 Aspen Technology, Inc.

 Data file created by ASPEN PLUS Rel. 9.2-1 on 16:33:11 Wed Dec 3, 1997

Run ID: COL-TOL Item: STREAM-SUM Screen: Stream-Sum.Main

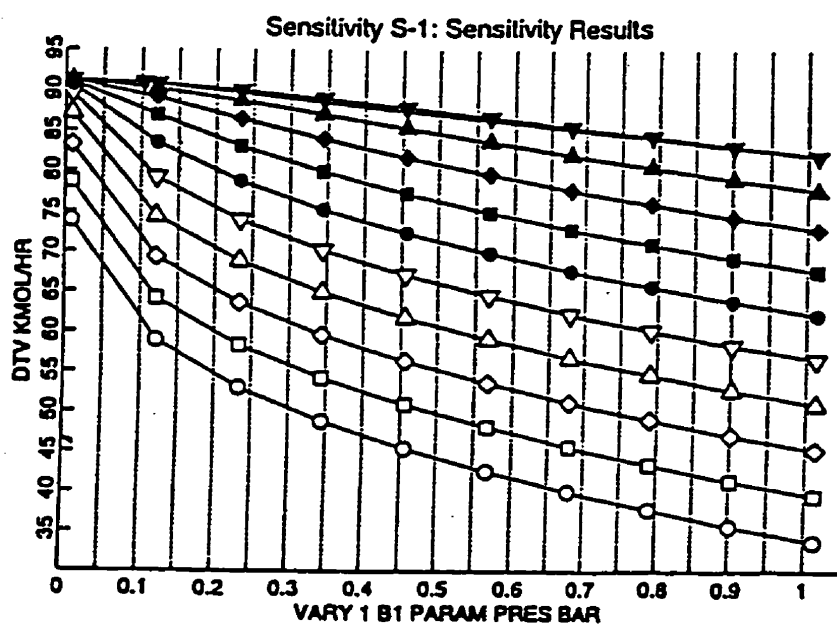
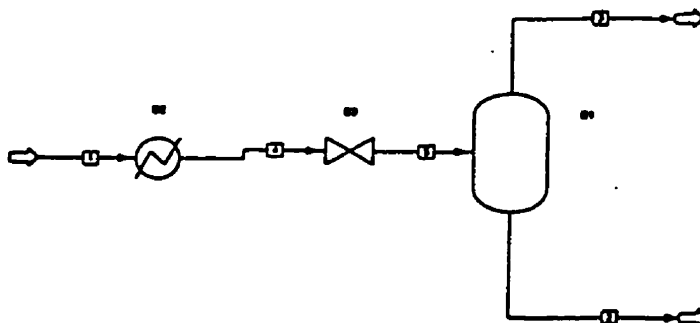
C-----C-----C-----C-----C-----C-----
 Display STREAMS 1 TOLUENE DIPHENYL
 Units: From COL-TOL COL-TOL
 Format: GEN_F To COL-TOL
 Phas LIQUID LIQUID LIQUID
 Temperature [C] 148.1 112.4 256.6
 Pressure [BAR] 2.41 1.01 1.35
 Vapor Frac 0.000 0.000 0.000
 Mole Flow [KMOL/HR] 95.730 91.139 4.591
 Mass Flow [KG/HR] 9099.931 8397.574 702.357
 Volume Flow [CUM/HR] 12.075 10.812 0.835
 Enthalpy [MMBTU/HR] 3.541 2.300 0.798
 Mole Flow [KMOL/HR]
 H2
 CH4
 BENZENE
 TOLUENE 91.230 91.139 0.091
 DIPHENYL 4.500 trace 4.500
 Mole Frac

Display STREAMS 1 TOLUENE DIPHENYL
 Units: From COL-TOL COL-TOL
 Format: GEN_F To COL-TOL
 Phas LIQUID LIQUID LIQUID
 H2
 CH4
 BENZENE
 TOLUENE 0.953 1.000 0.020
 DIPHENYL 0.047 49 PPB 0.980

(c) 1995 Aspen Technology, Inc.

ANNEXE 5

RÉSULTATS DE LA SIMULATION PARTIELLE DU FLASH DE SÉPARATION DU TOLUÈNE



Note : chaque courbe représente une valeur de la quantité de chaleur ajoutée dans le flash

DTV : débit de toluène récupéré dans la phase vapeur en kmol / hr

PRES : pression en bar

ANNEXE 6

**RÉPARTITION DES COMPOSANTS CHIMIQUES
DANS LES MODULES SEP 2**

Réglage du diviseur principal à l'entrée du groupe purge et recyclage du gaz :

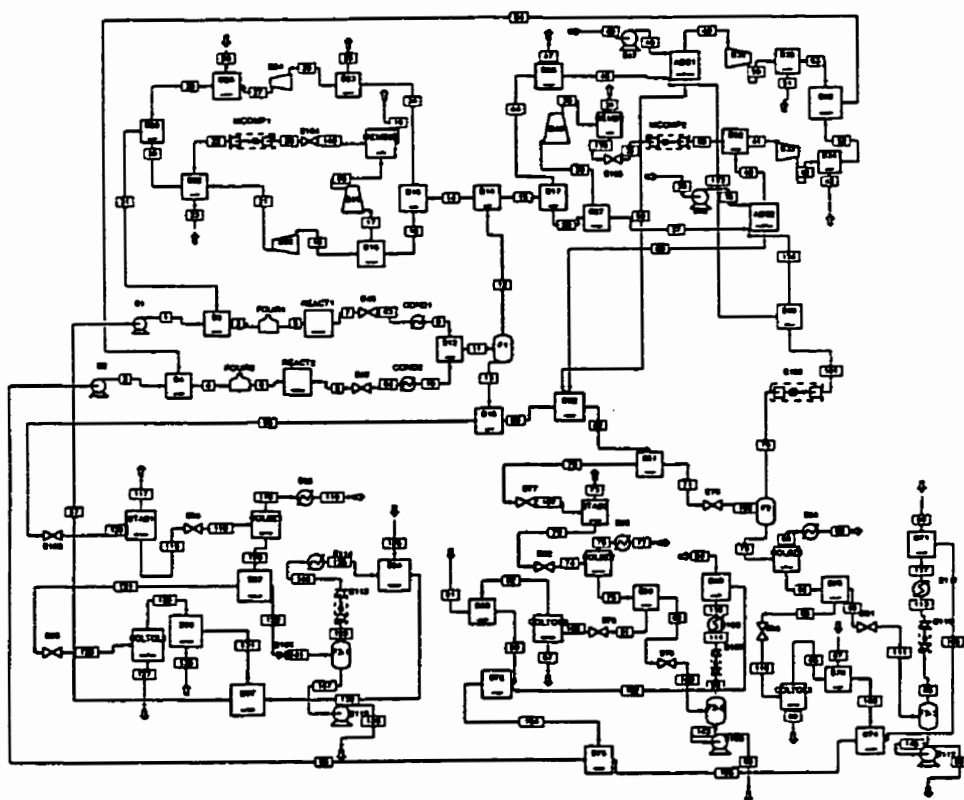
Composants	Recyclage du benzène	Récupération du benzène
H ₂	0,51	0,492
CH ₄	0,5	0,499
Benzène	0,507	0,49
Toluène	0,49	0,503
Diphényl	0	0

Réglage du diviseur principal à l'entrée du groupe séparation du liquide :

Composants	Purge et recyclage Du benzène	Récupération de l'hydrogène et recyclage du benzène
H ₂	0,51	0,48
CH ₄	0,504	0,49
Benzène	0,511	0,488
Toluène	0,5	0,499
Diphényl	0,51	0,489

ANNEXE 7

**SCHEMA D'ÉCOULEMENT DE LA SUPERSTRUCTURE
À « PROCÉDÉS CONCURRENTS »²**



² Un schéma avec une échelle plus grande est disponible à la fin du document

ANNEXE 8

**SPÉCIFICATIONS DES COURANTS D'ENTRÉE, DE SORTIE
ET DES PARCOURS DE TRANSIT
POUR LE CALCUL DES RENDMENTS EXERGÉTIQUES**

Alternatives	Courants d'entrée	Courants de sortie	Parcours de transit
B1-a	24 28 compresseur	29	26 → 29 28 → 29
B1-b	16 23 compresseur	30	18 → 30 23 → 30 18 → 30
B2-a	51 48 44 133 pompe compresseur	53 59	51 → 53 48 → 53 45 → 59 133 → 59 133 → 53
B2-b	32 164 43 39 pompe compresseurs	52 60	37 → 60 37 → 52 43 → 52 39 → 60 134 → 60 134 → 40
B3-a	121 130 rebouilleur	127 131 condenseur	121 → 127 121 → 131 130 → 131
B3-b	122 125 pompe compresseur chaleur dans le flash	126 132 refroidissement à la sortie du flash	122 → 132 122 → 126 125 → 132
B4-a	81 91 rebouilleur	87 99 condenseur	81 → 87 81 → 99 91 → 99

Alternatives	Courants d'entrée	Courants de sortie	Parcours de transit
B4-b	82 94 pompe compresseur chaleur dans le flash	88 102 refroidissement sortie flash	82 → 102 82 → 88 94 → 102
B5-a	85 97 rebouilleur	89 100 condenseur	97 → 100 85 → 100 85 → 89
B5-b	86 96 pompe compresseur chaleur dans le flash	90 103 refroidissement sortie flash	86 → 90 86 → 103 96 → 103

ANNEXE 9

EXPRESSIONS ALGÈBRIQUES DES CONSOMMATIONS D'EXERGIE

Note : pour les numéros des courants, se référer sur la schéma d'écoulement de la superstructure à «procédés concurrents» de l'annexe 7.

B1-a :

Consommation d'exergie thermomécanique

$$Bp = E_{TP}^{27} - E_{TP}^{26} + m_{28}(e_{TP}^{28} - e_{TP}^{29})$$

$$Bt = m_{25}e_{TP}^{24}$$

Consommation d'exergie chimique

$$Bp = n_T^{25}ex_T^{24} + n_T^{26}(ex_T^{26} - ex_T^{29}) + n_{H2}^{28}(ex_{H2}^{28} - ex_{H2}^{29})$$

$$Bt = n_{Bz}^{25}ex_{Bz}^{24} + n_M^{26}(ex_M^{26} - ex_M^{29}) + n_{Bz}^{26}(ex_{Bz}^{26} - ex_{Bz}^{29}) + n_{H2}^{25}ex_{H2}^{24} + n_M^{25}ex_M^{24}$$

B1-b :

Consommation d'exergie thermomécanique

$$Bp = E_{TP}^{65} - E_{TP}^{17} + E_{TP}^{22} - E_{TP}^{20} + E_{TP}^{21} - E_{TP}^{18} + m_{23}(e_{TP}^{23} - e_{TP}^{30})$$

$$Bt = m_{19}e_{TP}^{65} + m_{20}(e_{TP}^{20} - e_{TP}^{65}) + m_{22}(e_{TP}^{22} - e_{TP}^{34})$$

Consommation d'exergie chimique

$$BP = n_T^{19}ex_T^{65} + n_{H2}^{23}(ex_{H2}^{23} - ex_{H2}^{30})$$

$$Bt = n_M ex_M^{65} + n_{Bz} ex_{Bz}^{65} + n_{H2}^{22}(ex_{H2} - ex_{H2}^{30})$$

B2-a :

Consommation d'exergie thermomécanique

$$Bp = E_{TP}^{46} - E_{TP}^{48} + E_{TP}^{50} - E_{TP}^{49} + m_{51}(e_{TP}^{51} - e_{TP}^{53})$$

$$Bt = m^{47}e_{TP}^{44}$$

Consommation d'exergie chimique

$$Bp = n_T^{47} ex_T^{44} + n_T^{46} (ex_T^{46} - ex_T^{59}) + n_{H_2}^{51} (ex_{H_2}^{51} - ex_{H_2}^{53})$$

$$Bt = n_{H_2}^{47} ex_{H_2}^{44} + n_{Bz}^{47} ex_{Bz}^{44} + n_M^{47} ex_M^{44} + n_M^{49} (ex_M^{49} - ex_M^{53})$$

B2-b :

Consommation d'exergie thermomécanique

$$Bp = E_{TP}^{36} - E_{TP}^{33} + E_{TP}^{69} - E_{TP}^{35} + E_{TP}^{38} - E_{TP}^{39} + E_{TP}^{42} - E_{TP}^{41}$$

$$Bt = m_{34} e_{TP}^{36} + m_{35} (e_{TP}^{36} - e_{TP}^{35})$$

Consommation d'exergie chimique

$$Bp = n_T^{34} ex_T^{36} + n_T^{38} (ex_T^{38} - ex_T^{60}) + n_{H_2}^{43} (ex_{H_2}^{43} - ex_{H_2}^{52})$$

$$Bt = n_M^{34} ex_M^{36} + n_{Bz}^{34} ex_{Bz}^{36} + n_{H_2}^{69} (ex_{H_2}^{69} - ex_{H_2}^{41}) + n_M^{40} (ex_M^{40} - ex_M^{41}) + n_M^{42} (ex_M^{42} - ex_M^{52})$$

B3-a :

Consommation d'exergie thermomécanique

$$Bt = m_{129} (e_{TP}^{128} - e_{TP}^{129}) + m_{129} (e_{TP}^{129} - e_{TP}^{131}) - E_{TP}^{128} + E_{TP}^{121}$$

Consommation d'exergie chimique

$$Bt = n_T^{127} (ex_T^{128} - ex_T^{127})$$

B3-b :

Consommation d'exergie thermomécanique

$$Bp = E_{TP}^{146} - E_{TP}^{123} + E_{TP}^{126} - E_{TP}^{147}$$

$$Bt = E_{TP}^{122} - E_{TP}^{141} + E_{TP}^{146} - E_{TP}^{135} + m_{135} (e_{TP}^{135} - e_{TP}^{102})$$

Consommation d'exergie chimique

$$Bt = n_T^{126} (ex_T^{141} - ex_T^{126})$$

B4-a :

Consommation d'exergie thermomécanique

$$Bp = m_{87} (e_{TP}^{87} - e_{TP}^{108})$$

$$Bt = m_{92}(e_{TP}^{108} - e_{TP}^{92}) + m_{92}(e_{TP}^{92} - e_{TP}^{99}) - E_{TP}^{108} + E_{TP}^{81}$$

Consommation d'exergie chimique

$$Bt = n_T^{87}(ex_T^{108} - ex_T^{87})$$

B4-b :

Consommation d'exergie thermomécanique

$$Bp = E_{TP}^{114} - E_{TP}^{93} + E_{TP}^{88} - E_{TP}^{143}$$

$$Bt = E_{TP}^{82} - E_{TP}^{109} + E_{TP}^{114} - E_{TP}^{136} + m_{136}(e_{TP}^{136} - e_{TP}^{102})$$

Consommation d'exergie chimique

$$Bt = n_T^{88}(ex_T^{109} - ex_T^{88})$$

B5-a :

Consommation d'exergie thermomécanique

$$Bt = m_{98}(e_{TP}^{110} - e_{TP}^{98}) + m_{98}(e_{TP}^{98} - e_{TP}^{110}) + E_{TP}^{85} - E_{TP}^{110}$$

Consommation d'exergie chimique

$$Bt = n_T^{89}(e_{TP}^{110} - e_{TP}^{89})$$

B5-b :

Consommation d'exergie thermomécanique

$$Bp = E_{TP}^{113} - E_{TP}^{95} + E_{TP}^{90} - E_{TP}^{145}$$

$$Bt = E_{TP}^{86} - E_{TP}^{11} + E_{TP}^{113} - E_{TP}^{137} + m_{137}(e_{TP}^{137} - e_{TP}^{103})$$

Consommation d'exergie chimique

$$Bt = n_T^{90}(ex_T^{111} - ex_T^{90})$$

B6-a1 :

Consommation d'exergie thermomécanique

$$Bt = E_{TP}^{70} - E_{TP}^{107} + m_{73}e_{TP}^{107} + E_{TP}^{72} - E_{TP}^{74} + m_{76}(e_{TP}^{74} - e_{TP}^{76})$$

Consommation d'exergie chimique

$$Bp = n_T^{34}ex_T^{36} + n_T^{38}(ex_T^{38} - ex_T^{60}) + n_{H2}^{43}(ex_{H2}^{43} - ex_{H2}^{52})$$

$$Bt = n_M^{34} ex_M^{36} + n_{Bz}^{34} ex_{Bz}^{36} + n_{H2}^{69} (ex_{H2}^{69} - ex_{H2}^{41}) + n_M^{40} (ex_M^{40} - ex_M^{41}) + n_M^{42} (ex_M^{42} - ex_M^{52})$$

B6-bl :

Consommation d'exergie thermomécanique

$$Bp = E_{TP}^{101} - E_{TP}^{78}$$

$$Bt = E_{TP}^{71} - E_{TP}^{106}$$

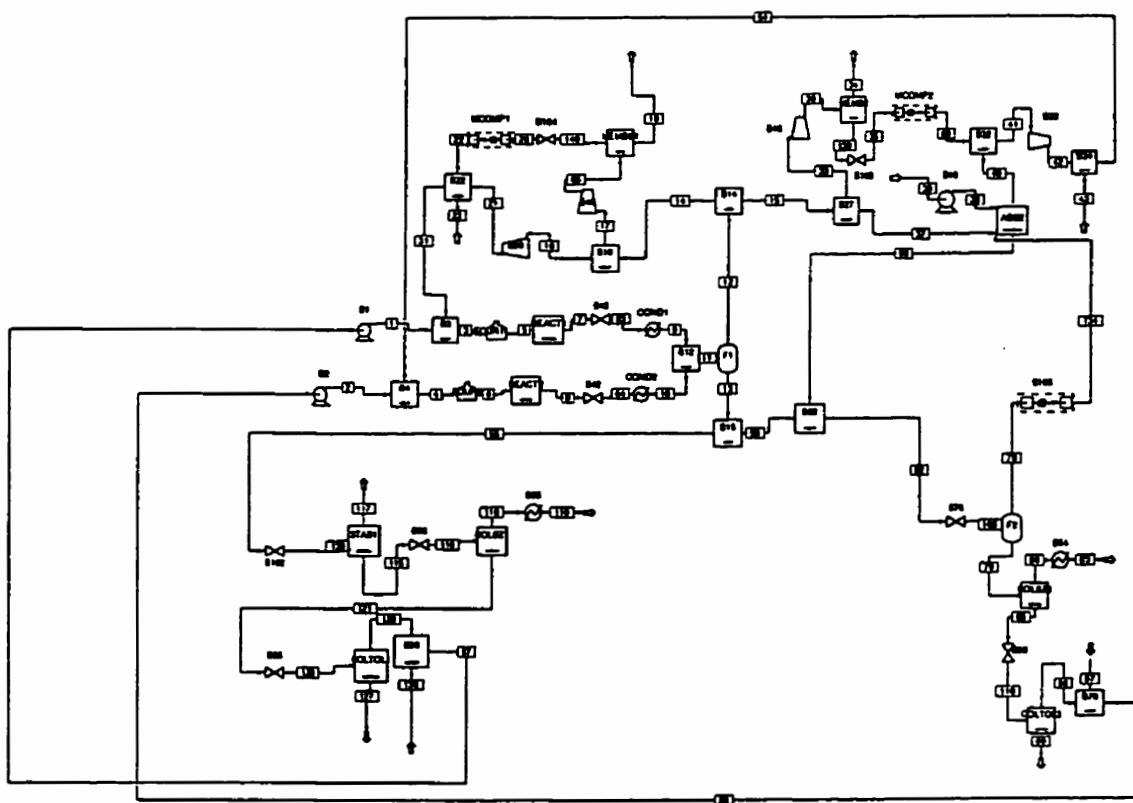
Flash F1 :

Consommation d'exergie chimique

$$Bp = n_T^{12} (ex_T^{11} - ex_T^{12}) + n_{H2}^{13} (ex_{H2}^{11} - ex_{H2}^{13})$$

ANNEXE 10

**SCHÉMA D'ÉCOULEMENT DE LA SUPERSTRUCTURE
APRÈS LA PREMIÈRE ET LA DEUXIÈME RÉDUCTION³**



³ Un schéma avec une échelle plus grande est disponible à la fin du document

Data file created by ASPEN PLUS Rel. 9.2-1 on 20:06:06 Mon Oct 20, 1997
Run ID: SOLUTION Item: STREAM-SUM Screen: Stream-Sum.Main

Display	2	4	6	8
	B2	B4	FOUR2	REACT2
Format:	B4	FOUR2	REACT2	B42
	LIQUID	MIXED	VAPOR	VAPOR
Temperature C	62.100000	59.000000	621.100000	690.900000
Pressure BAR	37.920000	37.920000	34.470000	34.470000
Vapor Frac	0.000000	0.873000	1.000000	1.000000
Mole Flow KMOL/HR	359.842000	2856.006000	2855.944000	2855.944000
Mass Flow KG/HR	33152.320000	48157.129000	48157.102000	48157.102000
Volume Flow CUM/HR	40.065000	1889.264000	6237.002000	6719.138000
Enthalpy MMBTU/HR	6.197000	-38.478000	58.921000	58.921000
Mole Flow KMOL/HR				
H2	0.000000	1817.163000	1817.094000	1547.594000
CH4	0.000000	673.002000	673.009000	946.766000
BENZENE	0.265000	0.833000	0.833000	266.077000
TOLUENE	359.577000	365.008000	365.008000	91.252000
DIPHENYL	0.000000	0.000000	0.000000	4.256000
Mole Frac				
H2	0.000000	0.636000	0.636000	0.542000
CH4	0.000000	0.236000	0.236000	0.332000
BENZENE	7.370000E-04	2.920000E-04	2.920000E-04	0.093000
TOLUENE	0.999000	0.128000	0.128000	0.032000
DIPHENYL	1.180000E-07	1.500000E-08	1.500000E-08	0.001000
AVAILMX KJ/KG	1244.589000	559.537000	1538.648000	1445.378000
T=25.00000				
P=1.013000				
AVAILMX KJ/KG	1236.025000	84.040000	91.297000	-173.181000

11	12	13	33	34
COND2	FLASHF1	FLASHF1	B27	MEMB2
FLASHF1	ABS2	B82	B46	
MIXED	VAPOR	LIQUID	VAPOR	VAPOR
37.800000	37.800000	37.800000	41.800000	70.800000
32.060000	32.060000	32.060000	32.060000	41.010000
0.876000	1.000000	0.000000	1.000000	1.000000
2855.944000	2500.520000	355.425000	758.211000	289.144000
48157.102000	19557.873000	28599.230000	5779.349000	4833.767000
2071.219000	2037.521000	33.699000	626.313000	194.152000
-50.915000	-64.050000	13.135000	-19.770000	-19.789000
1547.594000	1545.818000	1.775000	469.066000	0.000000
946.766000	936.971000	9.794000	286.535000	286.535000
266.077000	15.942000	250.135000	0.247000	0.247000
91.252000	1.788000	89.464000	2.362000	2.362000
4.256000	0.000000	4.256000	0.000000	0.000000
0.542000	0.618000	0.005000	0.619000	0.000000
0.332000	0.375000	0.028000	0.378000	0.991000
0.093000	0.006000	0.704000	3.260000E-04	8.540000E-04
0.032000	7.150000E-04	0.252000	0.003000	0.008000
0.001000	8.500000E-08	0.012000	0.000000	0.000000
283.354000	-1425.980000	1452.299000	-1542.220000	-2388.901000
-165.485000	-2524.699000	1447.887000	-2670.664000	-2934.958000

35	36	37	38	39
B103	B46	B27	B48	
MCOMP2	MEMB2	B32	ABS2	B48
VAPOR	VAPOR	VAPOR	LIQUID	LIQUID
72.600000	70.800000	41.800000	38.500000	38.000000
1.010000	41.010000	32.060000	32.060000	1.010000
1.000000	1.000000	1.000000	0.000000	0.000000
469.066000	758.211000	1743.309000	22.400000	22.400000
945.581000	5779.349000	13288.116000	2063.948000	2063.948000
13319.999000	537.571000	1440.044000	2.429000	2.427000
0.613000	-19.089000	-45.455000	0.305000	0.297000
469.066000	469.066000	1078.496000	0.000000	0.000000
0.000000	286.535000	658.813000	0.000000	0.000000
0.000000	0.247000	0.568000	0.000000	0.000000
0.000000	2.362000	5.431000	22.400000	22.400000
0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
1.000000	0.619000	0.619000	0.000000	0.000000
0.000000	0.378000	0.378000	0.000000	0.000000
0.000000	3.260000E-04	3.260000E-04	0.000000	0.000000
0.000000	0.003000	0.003000	1.000000	1.000000
0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
49.919000	-1449.263000	-1542.220000	1240.583000	1236.422000
0.441000	-2670.664000	-2670.664000	1235.965000	1235.965000
40	41	42	43	54
ABS2	B32	B33	B34	B34
B27	B33	B34	B34	B4
VAPOR	VAPOR	VAPOR	VAPOR	VAPOR
41.800000	42.900000	62.900000	38.000000	60.200000
32.060000	32.060000	37.920000	37.920000	37.920000
1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000
2501.520000	2212.375000	2212.375000	283.789000	2496.164000
19067.465000	14233.697000	14233.697000	771.112000	15004.810000
2066.356000	1839.516000	1659.506000	197.902000	1858.673000
-65.225000	-45.129000	-43.786000	-0.890000	-44.676000
1547.563000	1547.563000	1547.563000	269.600000	1817.163000
945.348000	658.813000	658.813000	14.189000	673.002000
0.815000	0.568000	0.568000	0.000000	0.568000
7.794000	5.431000	5.431000	0.000000	5.431000
0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
0.619000	0.700000	0.700000	0.950000	0.728000
0.378000	0.298000	0.298000	0.050000	0.270000
3.260000E-04	2.570000E-04	2.570000E-04	0.000000	2.270000E-04
0.003000	0.002000	0.002000	0.000000	0.002000
0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
-1542.220000	-1188.236000	-1114.008000	2218.235000	-951.640000
-2670.664000	-2526.905000	-2526.905000	-1109.826000	-2462.712000

58	60	62	64	69
B70	ABS2	B82	B42	MCOMP2
B2	B82	B76	COND2	B32
LIQUID	LIQUID	MIXED	VAPOR	VAPOR
61.300000	39.500000	37.900000	691.000000	49.000000
1.010000	32.060000	32.060000	32.060000	32.060000
0.000000	0.000000	0.000000	1.000000	1.000000
359.842000	33.697000	389.122000	2855.944000	469.066000
33152.320000	2794.602000	31393.832000	48157.102000	945.581000
40.029000	3.325000	37.025000	7218.780000	398.953000
6.050000	0.948000	14.083000	58.921000	0.326000
0.000000	0.176000	1.951000	1547.594000	469.066000
0.000000	0.900000	10.695000	946.766000	0.000000
0.265000	16.105000	266.241000	266.077000	0.000000
359.577000	16.515000	105.979000	91.252000	0.000000
0.000000	0.000000	4.256000	4.256000	0.000000
0.000000	0.005000	0.005000	0.542000	1.000000
0.000000	0.027000	0.027000	0.332000	0.000000
7.370000E-04	0.478000	0.684000	0.093000	0.000000
0.999000	0.490000	0.272000	0.032000	0.000000
1.180000E-07	7.000000E-06	0.011000	0.001000	0.000000
1239.556000	1359.961000	1443.742000	1434.602000	4284.719000
1236.025000	1355.339000	1439.312000	-173.181000	0.441000

78	79	80	83	84
FLASHF2	FLASHF2	COLBZ3	B64	COLBZ3
B106	COLBZ3	B64		B80
VAPOR	LIQUID	MIXED	MIXED	LIQUID
38.500000	38.500000	63.600000	25.000000	147.600000
2.070000	2.070000	2.070000	1.010000	2.410000
1.000000	0.000000	0.003000	0.004000	0.000000
12.297000	376.826000	266.457000	266.457000	110.369000
240.246000	31153.604000	20723.668000	20723.668000	10429.936000
153.293000	36.304000	35.531000	47.122000	13.882000
-0.567000	14.650000	13.564000	12.294000	3.976000
1.920000	0.031000	0.031000	0.031000	0.000000
9.278000	1.418000	1.418000	1.418000	0.000000
0.978000	265.262000	264.997000	264.997000	0.265000
0.121000	105.858000	0.011000	0.011000	105.848000
0.000000	4.256000	0.000000	0.000000	4.256000
0.156000	8.200000E-05	1.160000E-04	1.160000E-04	0.000000
0.754000	0.004000	0.005000	0.005000	0.000000
0.080000	0.704000	0.995000	0.995000	0.002000
0.010000	0.281000	4.000000E-05	4.000000E-05	0.959000
8.340000E-07	0.011000	0.000000	0.000000	0.039000
-1365.068000	1460.193000	1591.678000	1587.552000	1297.604000
-1456.029000	1459.575000	1587.567000	1587.552000	1258.532000

89	97	98	106	110	134	139
COLTOL3		COLTOL3	B76	B80	B106	MEMB2
	B70	B70	FLASHF2	COLTOL3	ABS2	B103
LIQUID	LIQUID	LIQUID	MIXED	MIXED	VAPOR	VAPOR
254.000000	38.000000	112.300000	38.500000	124.500000	120.000000	70.800000
1.350000	1.010000	1.010000	2.070000	1.350000	32.060000	41.010000
0.000000	0.000000	0.000000	0.032000	0.138000	1.000000	1.000000
4.362000	253.835000	106.007000	389.122000	110.369000	12.297000	469.066000
666.098000	23388.482000	9763.817000	31393.832000	10429.936000	240.246000	945.581000
0.790000	27.508000	12.570000	189.586000	369.847000	12.287000	334.183000
0.752000	3.368000	2.682000	14.083000	3.976000	-0.531000	0.613000
0.000000	0.000000	0.000000	1.951000	0.000000	1.920000	469.066000
0.000000	0.000000	0.000000	10.695000	0.000000	9.278000	0.000000
0.000000	0.000000	0.265000	266.241000	0.265000	0.978000	0.000000
0.106000	253.835000	105.742000	105.979000	105.848000	0.121000	0.000000
4.256000	0.000000	0.000000	4.256000	4.256000	0.000000	0.000000
0.000000	0.000000	0.000000	0.005000	0.000000	0.156000	1.000000
0.000000	0.000000	0.000000	0.027000	0.000000	0.754000	0.000000
2.000000E-06	0.000000	0.003000	0.684000	0.002000	0.080000	0.000000
0.024000	1.000000	0.997000	0.272000	0.959000	0.010000	0.000000
0.976000	0.000000	4.010000E-07	0.011000	0.039000	8.340000E-07	0.000000
1762.378000	1236.422000	1256.335000	1438.574000	1296.444000	-997.496000	4627.076000
1647.231000	1235.965000	1236.253000	1437.265000	1270.583000	-1456.029000	0.441000

ANNEXE 12**FICHIERS DE DONNÉES DES SIMULATIONS**

Fichier de données de la simulation de la superstructure

à «procédés concurrentes» :

::Input Summary created by ASPEN PLUS Rel. 9.3-1 at 08:57:11 Wed Oct 29, 1997;
Directory SYSSYSDEVICE:[USER.DIALLO] Filename inputss.inp;

```

TITLE 'SIMULATION DE LA SUPERSTRUCTURE'
IN-UNITS SI MASS-FLOW='KG/HR' MOLE-FLOW='KMOL/HR' &
VOLUME-FLOW='CUM/HR' PRESSURE=BAR TEMPERATURE=C DELTA-T=C
&PDROP-PER-HT='MBAR/M' PDROP=BAR
DEF-STREAMS CONVEN ALL
DATABANKS PURECOMP / AQUEOUS / SOLIDS / INORGANIC / &
NOASPENPCD
PROP-SOURCES PURECOMP / AQUEOUS / SOLIDS / INORGANIC
COMPONENTS
  H2 H2 H2 /
  CH4 CH4 CH4 /
  BENZENE C6H6 BENZENE /
  TOLUENE C7H8 TOLUENE /
  DIPHENYL C12H10 DIPHENYL
FLOWSHEET
  BLOCK B1 IN=57 OUT=1
  BLOCK B2 IN=58 OUT=2
  BLOCK B3 IN=1 31 OUT=3
  BLOCK B4 IN=2 54 OUT=4
  BLOCK FOUR1 IN=3 OUT=5
  BLOCK FOUR2 IN=4 OUT=6
  BLOCK REACT1 IN=5 OUT=7
  BLOCK REACT2 IN=6 OUT=8
  BLOCK COND1 IN=63 OUT=9
  BLOCK COND2 IN=64 OUT=10
  BLOCK B12 IN=9 10 OUT=11
  BLOCK F1 IN=11 OUT=12 13
  BLOCK B14 IN=12 OUT=15 14
  BLOCK B15 IN=13 OUT=55 56
  BLOCK B16 IN=14 OUT=24 16
  BLOCK B17 IN=15 OUT=44 32
  BLOCK B18 IN=16 OUT=17 18
  BLOCK MEMBS1 IN=65 OUT=19 140
  BLOCK B20 IN=18 OUT=21
  BLOCK B22 IN=22 21 23 OUT=30

```

BLOCK B23 IN=24 OUT=25 26
BLOCK B24 IN=26 OUT=27
BLOCK B25 IN=27 28 OUT=29
BLOCK B26 IN=29 30 OUT=31
BLOCK B27 IN=32 OUT=33 37
BLOCK MEMB2 IN=36 OUT=34 139
BLOCK ABS2 IN=37 38 134 OUT=40 60
BLOCK B32 IN=40 69 OUT=41
BLOCK B33 IN=41 OUT=42
BLOCK B34 IN=42 43 OUT=52
BLOCK B35 IN=44 OUT=45 47
BLOCK ABS1 IN=45 46 133 OUT=49 59
BLOCK B38 IN=49 OUT=50
BLOCK B39 IN=50 51 OUT=53
BLOCK B40 IN=52 53 OUT=54
BLOCK B42 IN=8 OUT=64
BLOCK B43 IN=7 OUT=63
BLOCK B45 IN=17 OUT=65
BLOCK B46 IN=33 OUT=36
BLOCK B47 IN=48 OUT=46
BLOCK B48 IN=39 OUT=38
BLOCK MCOMP1 IN=20 OUT=22
BLOCK MCOMP2 IN=35 OUT=69
BLOCK B51 IN=62 OUT=70 71
BLOCK STAB2 IN=107 OUT=73 72
BLOCK F2 IN=106 OUT=78 79
BLOCK COLBZ2 IN=74 OUT=76 75
BLOCK COLBZ3 IN=79 OUT=80 84
BLOCK B56 IN=75 OUT=81 82
BLOCK COLTOL2 IN=108 OUT=92 87
BLOCK F3-2 IN=109 OUT=93 143
BLOCK B62 IN=72 OUT=74
BLOCK B63 IN=76 OUT=77
BLOCK B64 IN=80 OUT=83
BLOCK B65 IN=84 OUT=85 86
BLOCK COLTOL3 IN=110 OUT=98 89
BLOCK F3-3 IN=111 OUT=95 145
BLOCK B68 IN=91 92 OUT=99
BLOCK B69 IN=94 136 OUT=102
BLOCK B70 IN=97 98 OUT=100
BLOCK B71 IN=96 137 OUT=103
BLOCK B72 IN=99 102 OUT=104

BLOCK B74 IN=103 100 OUT=105
 BLOCK B75 IN=104 105 OUT=58
 BLOCK B76 IN=71 OUT=106
 BLOCK B77 IN=70 OUT=107
 BLOCK B78 IN=81 OUT=108
 BLOCK B79 IN=82 OUT=109
 BLOCK B80 IN=85 OUT=110
 BLOCK B81 IN=86 OUT=111
 BLOCK B82 IN=56 59 60 OUT=62
 BLOCK STAB1 IN=138 OUT=117 115
 BLOCK COLBZ1 IN=116 OUT=118 120
 BLOCK B85 IN=118 OUT=119
 BLOCK B86 IN=115 OUT=116
 BLOCK B87 IN=120 OUT=121 122
 BLOCK COLTOL1 IN=128 OUT=129 127
 BLOCK F3-1 IN=141 OUT=123 147
 BLOCK B94 IN=125 135 OUT=132
 BLOCK B95 IN=121 OUT=128
 BLOCK B96 IN=129 130 OUT=131
 BLOCK B97 IN=131 132 OUT=57
 BLOCK B98 IN=101 OUT=133 134
 BLOCK B102 IN=55 OUT=138
 BLOCK B103 IN=139 OUT=35
 BLOCK B104 IN=140 OUT=20
 BLOCK B106 IN=78 OUT=101
 BLOCK B108 IN=114 OUT=136
 BLOCK B109 IN=143 OUT=88
 BLOCK B111 IN=113 OUT=137
 BLOCK B112 IN=145 OUT=90
 BLOCK B114 IN=146 OUT=135
 BLOCK B115 IN=147 OUT=126
 BLOCK B5 IN=123 OUT=146
 BLOCK B11 IN=122 OUT=141
 BLOCK B13 IN=93 OUT=114
 BLOCK B19 IN=95 OUT=113

PROPERTIES RK-SOAVE

PROP-DATA RKSKIJ-1

IN-UNITS SI MASS-FLOW='KG/HR' MOLE-FLOW='KMOL/HR' &

VOLUME-FLOW='CUM/HR' PRESSURE=BAR TEMPERATURE=C

DELTA-T=C &

PDROP-PER-HT='MBAR/M' PDROP=BAR

PROP-LIST RKSKIJ BPVAL H2 CH4 -.0222000000

BPVAL H2 TOLUENE .3900000000
BPVAL CH4 TOLUENE .0978000000
BPVAL CH4 H2 -.0222000000
BPVAL CH4 BENZENE .0209000000
BPVAL BENZENE CH4 .0209000000
BPVAL TOLUENE CH4 .0978000000
BPVAL TOLUENE H2 .3900000000
PROP-SET PS-1 AVAILMX UNITS='KJ/KG' SUBSTREAM=MIXED
PROP-SET PS-2 AVAILMX UNITS='KJ/KG' SUBSTREAM=MIXED TEMP=25 &
PRES=1.013

STREAM 23
SUBSTREAM MIXED TEMP=38 PRES=37.92
MOLE-FLOW H2 68.72 / CH4 3.62 / BENZENE 0 / TOLUENE 0 &
/ DIPHENYL 0

STREAM 28
SUBSTREAM MIXED TEMP=38 PRES=37.92
MOLE-FLOW H2 195 / CH4 10.26 / BENZENE 0 / TOLUENE 0 &
/ DIPHENYL 0 STREAM 39
SUBSTREAM MIXED TEMP=38 PRES=1.013
MOLE-FLOW H2 0 / CH4 0 / BENZENE 0 / TOLUENE 5.6 / &
DIPHENYL 0

STREAM 43
SUBSTREAM MIXED TEMP=38 PRES=37.92
MOLE-FLOW H2 69.014 / CH4 3.63 / TOLUENE 0

STREAM 48
SUBSTREAM MIXED TEMP=38 PRES=1.013
MOLE-FLOW H2 0 / CH4 0 / BENZENE 0 / TOLUENE 5.6 / &
DIPHENYL 0

STREAM 51
SUBSTREAM MIXED TEMP=38 PRES=37.92
MOLE-FLOW H2 194.617 / CH4 10.085 / BENZENE 0 / &
TOLUENE 0 / DIPHENYL 0

STREAM 57
SUBSTREAM MIXED TEMP=38 PRES=1.013
MOLE-FLOW H2 0 / CH4 0 / BENZENE 0 / TOLUENE 279.6 / &
DIPHENYL 0

STREAM 58
SUBSTREAM MIXED TEMP=38.8 PRES=1.013
MOLE-FLOW H2 0 / CH4 0 / BENZENE 0 / TOLUENE 281 / &
DIPHENYL 0

STREAM 91
SUBSTREAM MIXED TEMP=38 PRES=1.013
MOLE-FLOW H2 0 / CH4 0 / BENZENE 0 / TOLUENE 31.58 / &
DIPHENYL 0 STREAM 94
SUBSTREAM MIXED TEMP=38 PRES=1.013
MOLE-FLOW H2 0 / CH4 0 / BENZENE 0 / TOLUENE 32.53 / &
DIPHENYL 0
STREAM 96 SUBSTREAM MIXED TEMP=38 PRES=1.013
MOLE-FLOW H2 0 / CH4 0 / BENZENE 0 / TOLUENE 32.8 / &
DIPHENYL 0
STREAM 97 SUBSTREAM MIXED TEMP=38 PRES=1.013
MOLE-FLOW H2 0 / CH4 0 / BENZENE 0 / TOLUENE 31.9 / &
DIPHENYL 0
STREAM 125
SUBSTREAM MIXED TEMP=38 PRES=1.013
MOLE-FLOW H2 0 / CH4 0 / TOLUENE 71.04 / DIPHENYL 0
STREAM 130
SUBSTREAM MIXED TEMP=38 PRES=1.013
MOLE-FLOW H2 0 / CH4 0 / BENZENE 0 / TOLUENE 68.96 / &
DIPHENYL 0
BLOCK B3 MIXER
BLOCK B4 MIXER
BLOCK B12 MIXER
BLOCK B22 MIXER
BLOCK B25 MIXER
BLOCK B26 MIXER
BLOCK B32 MIXER
BLOCK B34 MIXER
BLOCK B39 MIXER
BLOCK B40 MIXER
BLOCK B68 MIXER
BLOCK B69 MIXER
BLOCK B70 MIXER
BLOCK B71 MIXER
BLOCK B72 MIXER
BLOCK B74 MIXER
BLOCK B75 MIXER
BLOCK B82 MIXER
BLOCK B94 MIXER
BLOCK B96 MIXER
BLOCK B97 MIXER
BLOCK B18 FSPLIT

```

    FRAC 17 0.3031
BLOCK B23 FSPLIT
    FRAC 25 0.3031
BLOCK B27 FSPLIT
    FRAC 33 0.3031
BLOCK B35 FSPLIT
    FRAC 47 0.3031
BLOCK B51 FSPLIT
    FRAC 70 0.5
BLOCK B56 FSPLIT
    FRAC 81 0.5
BLOCK B65 FSPLIT
    FRAC 85 0.5
BLOCK B87 FSPLIT
    FRAC 121 0.5
BLOCK B98 FSPLIT
    FRAC 133 0.5
BLOCK B14 SEP2
    DESCRIPTION "SEPARATEUR SORTIE F1 VAP : ENTRE +BZ ET - BZ"
    FRAC STREAM=14 SUBSTREAM=MIXED COMPS=H2 CH4 BENZENE &
        TOLUENE DIPHENYL FRACS=0.507 0.5005 0.507 0.496 0
BLOCK B15 SEP2
    DESCRIPTION "SEPARTEUR SORTIE F1 ENTRE +BZ ET - BZ"
    FRAC STREAM=55 SUBSTREAM=MIXED COMPS=H2 CH4 BENZENE &
        TOLUENE DIPHENYL FRACS=0.51 0.504 0.511 0.5 0.511
BLOCK B16 SEP2
    DESCRIPTION "GROUPE +H-BZ / -H -BZ"
    FRAC STREAM=16 SUBSTREAM=MIXED COMPS=H2 CH4 BENZENE &
        TOLUENE DIPHENYL FRACS=0.4966 0.477 0.487 0.486 0
BLOCK B17 SEP2
    DESCRIPTION "GROUPE RECYCLAGE +H+BZ / -H+BZ"
    FRAC STREAM=32 SUBSTREAM=MIXED COMPS=H2 CH4 BENZENE &
        TOLUENE DIPHENYL FRACS=0.494 0.478 0.486 0.485 0
BLOCK MEMB2 SEP2
    PARAM PRES=0
    FRAC STREAM=34 SUBSTREAM=MIXED COMPS=CH4 BENZENE
    TOLUENE &
        DIPHENYL FRACS=1 1 1 1
    FRAC STREAM=139 SUBSTREAM=MIXED COMPS=H2 FRACS=1
BLOCK MEMBS1 SEP2
    DESCRIPTION "MEMBRANE " PARAM PRES=0 FRAC STREAM=19

```

SUBSTREAM=MIXED COMPS=CH4 BENZENE TOLUENE & DIPHENYL
FRACS=1 1 1 1

FRAC STREAM=140 SUBSTREAM=MIXED COMPS=H2 FRACS=1 BLOCK
B11 HEATER PARAM PRES=0.12 DUTY=0 BLOCK B42 HEATER PARAM
PRES=32.06 DUTY=0 BLOCK B43 HEATER PARAM PRES=32.06 DUTY=0
BLOCK B62 HEATER PARAM PRES=2.07 DUTY=0
BLOCK B63 HEATER PARAM TEMP=25 PRES=1.013
BLOCK B64 HEATER PARAM TEMP=25 PRES=1.013
BLOCK B76 HEATER PARAM PRES=2.07 DUTY=0
BLOCK B77 HEATER PARAM PRES=17.57 DUTY=0
BLOCK B78 HEATER PARAM PRES=1.35 DUTY=0
BLOCK B79 HEATER PARAM PRES=0.12 DUTY=0
BLOCK B80 HEATER PARAM PRES=1.35 DUTY=0
BLOCK B81 HEATER PARAM PRES=0.12 DUTY=0
BLOCK B85 HEATER PARAM TEMP=25 PRES=1.013
BLOCK B86 HEATER PARAM PRES=2.41 DUTY=0
BLOCK B95 HEATER PARAM PRES=1.35 DUTY=0 BLOCK B102 HEATER
PARAM PRES=17.57 DUTY=0
BLOCK B103 HEATER PARAM PRES=-40 DUTY=0
BLOCK B104 HEATER PARAM PRES=-40 DUTY=0
BLOCK B108 HEATER PARAM PRES=1.013 VFRAC=0
BLOCK B111 HEATER PARAM PRES=1.013 VFRAC=0
BLOCK B114 HEATER PARAM PRES=1.013 VFRAC=0
BLOCK COND1 HEATER PARAM TEMP=37.77 PRES=32.06
BLOCK COND2 HEATER PARAM TEMP=37.77 PRES=32.06
BLOCK FOUR1 HEATER DESCRIPTION "FOUR DE PRECHAUFFAGE "
PARAM TEMP=621.1 PRES=34.47
BLOCK FOUR2 HEATER PARAM TEMP=621.1 PRES=34.47
BLOCK F1 FLASH2 DESCRIPTION "FLASH PRINCIPAL F1"PARAM PRES=32.06
DUTY=0
BLOCK F2 FLASH2 PARAM PRES=2.07 DUTY=0
BLOCK F3-1 FLASH2 PARAM PRES=0.12 DUTY=130000
BLOCK F3-2 FLASH2 PARAM PRES=0.12 DUTY=80000
BLOCK F3-3 FLASH2 PARAM PRES=0.12 DUTY=80000
BLOCK COLBZ1 DSTWU PARAM LIGHTKEY=BENZENE RECOVL=0.999
HEAVYKEY=TOLUENE & RECOVH=0.0001 PTOP=2.07 PBOT=2.41 RR=1.56
BLOCK COLBZ2 DSTWU PARAM LIGHTKEY=BENZENE RECOVL=0.999
HEAVYKEY=TOLUENE &
RECOVH=0.000001 PTOP=2.07 PBOT=2.41 RDV=0 RR=1.69
BLOCK COLBZ3 DSTWU PARAM LIGHTKEY=BENZENE RECOVL=0.999
HEAVYKEY=TOLUENE &
RECOVH=0.0001 PTOP=2.07 PBOT=2.41 RDV=0.003 RR=1.29

```

BLOCK COLTOL1 DSTWU    PARAM LIGHTKEY=TOLUENE RECOVL=0.999
HEAVYKEY=DIPHENYL &
  RECOVH=0.00001 PTOP=1.013 PBOT=1.35 RR=0.042
BLOCK COLTOL2 DSTWU    PARAM LIGHTKEY=TOLUENE RECOVL=0.999
HEAVYKEY=DIPHENYL &
  RECOVH=0.00001 PTOP=1.013 PBOT=1.35 RR=0.04
BLOCK COLTOL3 DSTWU    PARAM LIGHTKEY=TOLUENE RECOVL=0.999
HEAVYKEY=DIPHENYL &
  RECOVH=0.00001 PTOP=1.013 PBOT=1.35 RR=0.041
BLOCK STAB1 DSTWU    DESCRIPTION "colonne de stabilisation sans recuperation
de bn"    PARAM LIGHTKEY=CH4 RECOVL=0.999 HEAVYKEY=BENZENE &
  RECOVH=0.001 PTOP=17.23 PBOT=17.57 RDV=1 RR=0.0507
BLOCK STAB2 DSTWU    PARAM LIGHTKEY=CH4 RECOVL=0.999
HEAVYKEY=BENZENE &
  RECOVH=0.0011 PTOP=17.23 PBOT=17.57 RDV=1 RR=0.0344
BLOCK ABS1 RADFRAC    DESCRIPTION "ABSORBEUR AVEC -H"    PARAM
NSTAGE=11 ABSORBER=YES    FEEDS 45 11 ON-STAGE / 46 1 ON-STAGE /
133 11    PRODUCTS 49 1 V / 59 11 L    P-SPEC 1 32.06    COL-SPECS Q1=0
QN=0 MOLE-RDV=1
BLOCK ABS2 RADFRAC
  PARAM NSTAGE=11 ABSORBER=YES
  FEEDS 37 11 ON-STAGE / 38 1 ON-STAGE / 134 11
  PRODUCTS 40 1 V / 60 11 L
  P-SPEC 1 32.06    COL-SPECS Q1=0 QN=0 MOLE-RDV=1
BLOCK REACT1 RSTOIC
  DESCRIPTION "REACTEUR SANS RECYCLAGE DE BENZENE"
  PARAM PRES=34.47 DUTY=0 SERIES=YES
  STOIC 1 MIXED TOLUENE -1 / H2 -1 / BENZENE 1 / CH4 1
  STOIC 2 MIXED BENZENE -1 / H2 0.5 / DIPHENYL 0.5
  CONV 1 MIXED TOLUENE 0.75
  CONV 2 MIXED BENZENE 0.031
BLOCK REACT2 RSTOIC
  DESCRIPTION "REACTEUR AVEC RECYCLAGE DE TOLUENE "
  PARAM PRES=34.47 DUTY=0 SERIES=YES
  STOIC 1 MIXED TOLUENE -1 / H2 -1 / BENZENE 1 / CH4 1
  STOIC 2 MIXED BENZENE -1 / H2 0.5 / DIPHENYL 0.5
  CONV 1 MIXED TOLUENE 0.75
  CONV 2 MIXED BENZENE 0.031
BLOCK B1 PUMP    PARAM PRES=37.92 EFF=0.95
BLOCK B2 PUMP    PARAM PRES=37.92 EFF=0.95
BLOCK B47 PUMP    PARAM PRES=32.06 EFF=0.95
BLOCK B48 PUMP    PARAM PRES=32.06 EFF=0.95

```

BLOCK B109 PUMP PARAM PRES=1.013 EFF=0.95
 BLOCK B112 PUMP PARAM PRES=1.013 EFF=0.95
 BLOCK B115 PUMP PARAM PRES=1.013 EFF=0.95
 BLOCK B5 COMPR PARAM TYPE=GPSA-POLYTROP PRES=1.013 PEFF=0.72
 MEFF=0.7 PERFOR-PARAM GPSA-BASIS=SUCTION
 BLOCK B13 COMPR PARAM TYPE=GPSA-POLYTROP PRES=1.013 MEFF=0.7
 BLOCK B19 COMPR PARAM TYPE=GPSA-POLYTROP PRES=1.013 MEFF=0.7
 BLOCK B20 COMPR PARAM TYPE=GPSA-POLYTROP PRES=37.92 MEFF=0.95
 BLOCK B24 COMPR PARAM TYPE=GPSA-POLYTROP PRES=37.92 MEFF=0.95
 BLOCK B33 COMPR PARAM TYPE=GPSA-POLYTROP PRES=37.92 MEFF=0.95
 BLOCK B38 COMPR PARAM TYPE=GPSA-POLYTROP PRES=37.92 MEFF=0.95
 BLOCK B45 COMPR PARAM TYPE=GPSA-POLYTROP PRES=41.013 MEFF=0.95
 BLOCK B46 COMPR PARAM TYPE=GPSA-POLYTROP PRES=41.013 MEFF=0.95
 BLOCK B106 MCOMPR PARAM NSTAGE=2 TYPE=GPSA-POLYTROPIC
 PRES=32.06 FEEDS 78 1 PRODUCTS 101 2 COMPR-SPECS 1 MEFF=0.95 /
 2 MEFF=0.95 COOLER-SPECS 1 TEMP=120 / 2 TEMP=120
 BLOCK MCOMP1 MCOMPR PARAM NSTAGE=2 TYPE=GPSA-POLYTROPIC
 PRES=37.92 FEEDS 20 1 PRODUCTS 22 2 COMPR-SPECS 1 MEFF=0.95 / 2
 MEFF=0.95 COOLER-SPECS 1 TEMP=49 / 2 TEMP=49
 BLOCK MCOMP2 MCOMPR PARAM NSTAGE=2 TYPE=GPSA-POLYTROPIC
 PRES=32.06 FEEDS 35 1 PRODUCTS 69 2 COMPR-SPECS 1 MEFF=0.95 / 2
 MEFF=0.95 COOLER-SPECS 1 TEMP=49 / 2 TEMP=49 STREAM-REPOR
 MOLEFLOW MOLEFRAC PROPERTIES=PS-1 PS-2 ;;;;

Fichier de données de la simulation de la superstructure

à «procédés concurrentes» réduite :

::Input Summary created by ASPEN PLUS Rel. 9.3-1 at 09:02:28 Wed Oct 29, 1997;
Directory SYS\$SYSDEVICE:[USER.DIALLO] Filename reduc.inp;

TITLE 'SIMULATION DE LA SUPERSTRUCTURE RÉDUITE'
IN-UNITS SI MASS-FLOW='KG/HR' MOLE-FLOW='KMOL/HR' &
VOLUME-FLOW='CUM/HR' PRESSURE=BAR TEMPERATURE=C
DELTA-T=C &
PDROP-PER-HT='MBAR/M' PDROP=BAR
DEF-STREAMS CONVEN ALL
DATABANKS PURECOMP / AQUEOUS / SOLIDS / INORGANIC / &
NOASPENPCD

PROP-SOURCES PURECOMP / AQUEOUS / SOLIDS / INORGANIC

COMPONENTS

H2 H2 H2 /
CH4 CH4 CH4 /
BENZENE C6H6 BENZENE /
TOLUENE C7H8 TOLUENE /
DIPHENYL C12H10 DIPHENYL

FLOWSHEET

BLOCK B1 IN=57 OUT=1
BLOCK B2 IN=58 OUT=2
BLOCK B3 IN=1 30 OUT=3
BLOCK B4 IN=2 52 OUT=4
BLOCK FOUR1 IN=3 OUT=5
BLOCK FOUR2 IN=4 OUT=6
BLOCK REACT1 IN=5 OUT=7
BLOCK REACT2 IN=6 OUT=8
BLOCK COND1 IN=63 OUT=9
BLOCK COND2 IN=64 OUT=10
BLOCK B12 IN=9 10 OUT=11
BLOCK F1 IN=11 OUT=12 13
BLOCK B14 IN=12 OUT=32 16
BLOCK B15 IN=13 OUT=55 56
BLOCK B18 IN=16 OUT=17 18
BLOCK MEMBS1 IN=65 OUT=19 140

BLOCK B20 IN=18 OUT=21
 BLOCK B22 IN=22 21 23 OUT=30
 BLOCK B27 IN=32 OUT=33 37
 BLOCK MEMB2 IN=36 OUT=34 139
 BLOCK ABS2 IN=37 38 134 OUT=40 60
 BLOCK B32 IN=40 69 OUT=41
 BLOCK B33 IN=41 OUT=42
 BLOCK B34 IN=42 43 OUT=52
 BLOCK B42 IN=8 OUT=64
 BLOCK B43 IN=7 OUT=63
 BLOCK B45 IN=17 OUT=65
 BLOCK B46 IN=33 OUT=36
 BLOCK B48 IN=39 OUT=38
 BLOCK MCOMP1 IN=20 OUT=22
 BLOCK MCOMP2 IN=35 OUT=69
 BLOCK F2 IN=106 OUT=78 79
 BLOCK COLBZ3 IN=79 OUT=80 85
 BLOCK B64 IN=80 OUT=83
 BLOCK COLTOL3 IN=110 OUT=98 89
 BLOCK B70 IN=97 98 OUT=58
 BLOCK B76 IN=71 OUT=106
 BLOCK B80 IN=85 OUT=110
 BLOCK B82 IN=56 60 OUT=71
 BLOCK STAB1 IN=138 OUT=117 115
 BLOCK COLBZ1 IN=116 OUT=118 121
 BLOCK B85 IN=118 OUT=119
 BLOCK B86 IN=115 OUT=116
 BLOCK COLTOL1 IN=128 OUT=129 127
 BLOCK B95 IN=121 OUT=128
 BLOCK B96 IN=129 130 OUT=57
 BLOCK B102 IN=55 OUT=138
 BLOCK B103 IN=139 OUT=35
 BLOCK B104 IN=140 OUT=20
 BLOCK B106 IN=78 OUT=134

PROPERTIES RK-SOAVE

PROP-DATA RKSKIJ-1

IN-UNITS SI MASS-FLOW='KG/HR' MOLE-FLOW='KMOL/HR' &
 VOLUME-FLOW='CUM/HR' PRESSURE=BAR TEMPERATURE=C
 DELTA-T=C &
 PDROP-PER-HT='MBAR/M' PDROP=BAR

PROP-LIST RKSKIJ
BPVAL H2 CH4 -.0222000000
BPVAL H2 TOLUENE .3900000000
BPVAL CH4 TOLUENE .0978000000
BPVAL CH4 H2 -.0222000000
BPVAL CH4 BENZENE .0209000000
BPVAL BENZENE CH4 .0209000000
BPVAL TOLUENE CH4 .0978000000
BPVAL TOLUENE H2 .3900000000

PROP-SET PS-1 AVAILMX UNITS='KJ/KG' SUBSTREAM=MIXED

PROP-SET PS-2 AVAILMX UNITS='KJ/KG' SUBSTREAM=MIXED TEMP=25 &
PRES=1.013

STREAM 23

SUBSTREAM MIXED TEMP=38 PRES=37.92
MOLE-FLOW H2 142.5 / CH4 7.5 / BENZENE 0 / TOLUENE 0 &
/ DIPHENYL 0

STREAM 39

SUBSTREAM MIXED TEMP=38 PRES=1.013
MOLE-FLOW H2 0 / CH4 0 / BENZENE 0 / TOLUENE 11.657 / &
DIPHENYL 0

STREAM 43

SUBSTREAM MIXED TEMP=38 PRES=37.92
MOLE-FLOW H2 137.97 / CH4 7.26 / TOLUENE 0

STREAM 57

SUBSTREAM MIXED TEMP=38 PRES=1.013
MOLE-FLOW H2 0 / CH4 0 / BENZENE 0 / TOLUENE 279.6 / &
DIPHENYL 0

STREAM 58

SUBSTREAM MIXED TEMP=38.8 PRES=1.013
MOLE-FLOW H2 0 / CH4 0 / BENZENE 0 / TOLUENE 281 / &
DIPHENYL 0

STREAM 97

SUBSTREAM MIXED TEMP=38 PRES=1.013
MOLE-FLOW H2 0 / CH4 0 / BENZENE 0 / TOLUENE 131.07 / &

DIPHENYL 0

STREAM 130

SUBSTREAM MIXED TEMP=38 PRES=1.013

MOLE-FLOW H2 0 / CH4 0 / BENZENE 0 / TOLUENE 142.27 / &
DIPHENYL 0

BLOCK B3 MIXER

BLOCK B4 MIXER

BLOCK B12 MIXER

BLOCK B22 MIXER

BLOCK B32 MIXER

BLOCK B34 MIXER

BLOCK B70 MIXER

BLOCK B82 MIXER

BLOCK B96 MIXER

BLOCK B18 FSPLIT

FRAC 17 0.3031

BLOCK B27 FSPLIT

FRAC 33 0.3031

BLOCK B14 SEP2

DESCRIPTION "SEPARATEUR SORTIE F1 VAP : ENTRE +BZ ET - BZ"

FRAC STREAM=16 SUBSTREAM=MIXED COMPS=H2 CH4 BENZENE &
TOLUENE DIPHENYL FRACS=0.51 0.5 0.507 0.49 0

BLOCK B15 SEP2

DESCRIPTION "SEPARTEUR SORTIE F1 ENTRE +BZ ET - BZ"

FRAC STREAM=55 SUBSTREAM=MIXED COMPS=H2 CH4 BENZENE &
TOLUENE DIPHENYL FRACS=0.51 0.504 0.519 0.5 0.511

BLOCK MEMB2 SEP2

PARAM PRES=0

FRAC STREAM=34 SUBSTREAM=MIXED COMPS=CH4 BENZENE
TOLUENE &

DIPHENYL FRACS=1 1 1 1

FRAC STREAM=139 SUBSTREAM=MIXED COMPS=H2 FRACS=1

BLOCK MEMBS1 SEP2

DESCRIPTION "MEMBRANE "

PARAM PRES=0

FRAC STREAM=19 SUBSTREAM=MIXED COMPS=CH4 BENZENE
TOLUENE &

DIPHENYL FRACS=1 1 1 1
FRAC STREAM=140 SUBSTREAM=MIXED COMPS=H2 FRACS=1

BLOCK B42 HEATER
PARAM PRES=32.06 DUTY=0

BLOCK B43 HEATER
PARAM PRES=32.06 DUTY=0

BLOCK B64 HEATER
PARAM TEMP=25 PRES=1.013

BLOCK B76 HEATER
PARAM PRES=2.07 DUTY=0

BLOCK B80 HEATER
PARAM PRES=1.35 DUTY=0

BLOCK B85 HEATER
PARAM TEMP=25 PRES=1.013

BLOCK B86 HEATER
PARAM PRES=2.41 DUTY=0

BLOCK B95 HEATER
PARAM PRES=1.35 DUTY=0

BLOCK B102 HEATER
PARAM PRES=17.57 DUTY=0

BLOCK B103 HEATER
PARAM PRES=-40 DUTY=0

BLOCK B104 HEATER
PARAM PRES=-40 DUTY=0

BLOCK COND1 HEATER
PARAM TEMP=37.77 PRES=32.06

BLOCK COND2 HEATER
PARAM TEMP=37.77 PRES=32.06

BLOCK FOUR1 HEATER
 DESCRIPTION "FOUR DE PRECHAUFFAGE "
 PARAM TEMP=621.1 PRES=34.47

BLOCK FOUR2 HEATER
 PARAM TEMP=621.1 PRES=34.47

BLOCK F1 FLASH2
 DESCRIPTION "FLASH PRINCIPAL F1"
 PARAM PRES=32.06 DUTY=0

BLOCK F2 FLASH2
 PARAM PRES=2.07 DUTY=0

BLOCK COLBZ1 DSTWU
 PARAM LIGHTKEY=BENZENE RECOVL=0.999 HEAVYKEY=TOLUENE &
 RECOVH=0.0001 PTOP=2.07 PBOT=2.41 RR=1.56

BLOCK COLBZ3 DSTWU
 PARAM LIGHTKEY=BENZENE RECOVL=0.999 HEAVYKEY=TOLUENE &
 RECOVH=0.0001 PTOP=2.07 PBOT=2.41 RDV=0.003 RR=1.29

BLOCK COLTOL1 DSTWU
 PARAM LIGHTKEY=TOLUENE RECOVL=0.999 HEAVYKEY=DIPHENYL &
 RECOVH=0.00001 PTOP=1.013 PBOT=1.35 RR=0.042

BLOCK COLTOL3 DSTWU
 PARAM LIGHTKEY=TOLUENE RECOVL=0.999 HEAVYKEY=DIPHENYL &
 RECOVH=0.00001 PTOP=1.013 PBOT=1.35 RR=0.041

BLOCK STAB1 DSTWU
 DESCRIPTION "colonne de stabilisation sans recuperation de bn"
 PARAM LIGHTKEY=CH4 RECOVL=0.999 HEAVYKEY=BENZENE &
 RECOVH=0.001 PTOP=17.23 PBOT=17.57 RDV=1 RR=0.264

BLOCK ABS2 RADFRAC
 PARAM NSTAGE=11 ABSORBER=YES FEEDS 37 11 ON-STAGE / 38 1 ON-
 STAGE / 134 11 & ON-STAGE PRODUCTS 40 1 V / 60 11 L P-SPEC 1
 32.06 COL-SPECS Q1=0 QN=0
 MOLE-RDV=1

BLOCK REACT1 RSTOIC

DESCRIPTION "REACTEUR SANS RECYCLAGE DE BENZENE"
 PARAM PRES=34.47 DUTY=0 SERIES=YES STOIC 1 MIXED TOLUENE -1
 / H2 -1 / BENZENE 1 /
 CH4 1 STOIC 2 MIXED BENZENE -1 / H2 0.5 / DIPHENYL 0.5
 CONV 1 MIXED TOLUENE
 0.75 CONV 2 MIXED BENZENE 0.031

BLOCK REACT2 RSTOIC
 DESCRIPTION "REACTEUR AVEC RECYCLAGE DE TOLUENE "
 PARAM PRES=34.47 DUTY=0 SERIES=YES STOIC 1 MIXED TOLUENE -1 /
 H2 -1 / BENZENE 1 /
 CH4 1 STOIC 2 MIXED BENZENE -1 / H2 0.5 / DIPHENYL 0.5 CONV
 1 MIXED TOLUENE 0.75
 CONV 2 MIXED BENZENE 0.031

BLOCK B1 PUMP
 PARAM PRES=37.92 EFF=0.95

BLOCK B2 PUMP
 PARAM PRES=37.92 EFF=0.95

BLOCK B48 PUMP
 PARAM PRES=32.06 EFF=0.95

BLOCK B20 COMPR
 PARAM TYPE=GPSA-POLYTROP PRES=37.92 MEFF=0.95

BLOCK B33 COMPR
 PARAM TYPE=GPSA-POLYTROP PRES=37.92 MEFF=0.95

BLOCK B45 COMPR
 PARAM TYPE=GPSA-POLYTROP PRES=41.013 MEFF=0.95

BLOCK B46 COMPR
 PARAM TYPE=GPSA-POLYTROP PRES=41.013 MEFF=0.95

BLOCK B106 MCOMPR
 PARAM NSTAGE=2 TYPE=GPSA-POLYTROPIC PRES=32.06 FEEDS 78 1
 PRODUCTS 134 2
 COMPR-SPECS 1 MEFF=0.95 / 2 MEFF=0.95 COOLER-SPECS 1
 TEMP=120 / 2 TEMP=120

BLOCK MCOMP1 MCOMPR

PARAM NSTAGE=2 TYPE=GPSA-POLYTROPIC PRES=37.92 FEEDS 20 1
PRODUCTS 22 2
COMPR-SPECS 1 MEFF=0.95 / 2 MEFF=0.95 COOLER-SPECS 1
TEMP=49 / 2 TEMP=49

BLOCK MCOMP2 MCOMPR

PARAM NSTAGE=2 TYPE=GPSA-POLYTROPIC PRES=32.06 FEEDS 35 1
PRODUCTS 69 2
COMPR-SPECS 1 MEFF=0.95 / 2 MEFF=0.95 COOLER-SPECS 1
TEMP=49 / 2 TEMP=49

STREAM-REPOR MOLEFLOW MOLEFRAC PROPERTIES=PS-1 PS-2 ;;;;

Fichier de données de la simulation de la solution finale

;Input Summary created by ASPEN PLUS Rel. 9.3-1 at 08:41:31 Wed Oct 29,
1997;Directory SYS\$SYSDEVICE:[USER.DIALLO]
Filename inputsol.inp;
TITLE 'SIMULATION DE LA SLUTION FINALE'
IN-UNITS SI MASS-FLOW='KG/HR' MOLE-FLOW='KMOL/HR' &
VOLUME-FLOW='CUM/HR' PRESSURE=BAR TEMPERATURE=C DELTA-T=C
& PDROP-PER-HT='MBAR/M' PDROP=BAR DEF-STREAMS CONVEN ALL

DATABANKS PURECOMP / AQUEOUS / SOLIDS / INORGANIC / &
NOASPENPCDPROP-SOURCES PURECOMP / AQUEOUS / SOLIDS /
INORGANIC COMPONENTS H2 H2 H2 / CH4 CH4 CH4 / BENZENE C6H6
BENZENE / TOLUENE C7H8 TOLUENE / DIPHENYL C12H10 DIPHENYL

FLowsheet

BLOCK B2 IN=58 OUT=2
BLOCK B4 IN=2 54 OUT=4
BLOCK FOUR2 IN=4 OUT=6
BLOCK REACT2 IN=6 OUT=8
BLOCK COND2 IN=64 OUT=11
BLOCK FLASHF1 IN=11 OUT=12 13
BLOCK B27 IN=40 OUT=33 37
BLOCK MEMB2 IN=36 OUT=34 139
BLOCK ABS2 IN=38 134 12 OUT=40 60
BLOCK B32 IN=69 37 OUT=41
BLOCK B33 IN=41 OUT=42
BLOCK B34 IN=42 43 OUT=54
BLOCK B42 IN=8 OUT=64
BLOCK B46 IN=33 OUT=36
BLOCK B48 IN=39 OUT=38
BLOCK MCOMP2 IN=35 OUT=69
BLOCK FLASHF2 IN=106 OUT=78 79
BLOCK COLBZ3 IN=79 OUT=80 84
BLOCK B64 IN=80 OUT=83
BLOCK COLTOL3 IN=110 OUT=98 89
BLOCK B70 IN=97 98 OUT=58
BLOCK B76 IN=62 OUT=106
BLOCK B80 IN=84 OUT=110
BLOCK B82 IN=60 13 OUT=62
BLOCK B103 IN=139 OUT=35

BLOCK B106 IN=78 OUT=134

PROPERTIES RK-SOAVE PROP-DATA RKSKIJ-1

IN-UNITS SI MASS-FLOW='KG/HR' MOLE-FLOW='KMOL/HR' &
 VOLUME-FLOW='CUM/HR' PRESSURE=BAR TEMPERATURE=C DELTA-
 T=C &
 PDROP-PER-HT='MBAR/M' PDROP=BAR

PROP-LIST RKSKIJ BPVAL H2 CH4 .0222000000 BPVAL H2 TOLUENE
 .3900000000 BPVAL CH4 TOLUENE .0978000000 BPVAL CH4 H2 -
 .0222000000 BPVAL CH4 BENZENE .0209000000 BPVAL BENZENE CH4
 .0209000000 BPVAL TOLUENE CH4 .0978000000 BPVAL TOLUENE H2
 .3900000000 PROP-SET PS-1 AVAILMX UNITS='KJ/KG' SUBSTREAM=MIXED

PROP-SET PS-2

AVAILMX UNITS='KJ/KG' SUBSTREAM=MIXED TEMP=25 &
 PRES=1.013 PROP-SET PS-3 HMX UNITS='KJ/KG' SUBSTREAM=MIXED

STREAM 39 SUBSTREAM MIXED TEMP=38 PRES=1.013
 MOLE-FLOW H2 0 / CH4 0 / BENZENE 0 / TOLUENE 22.4 / &
 DIPHENYL 0 STREAM 43 SUBSTREAM MIXED TEMP=38 PRES=37.92
 MOLE-FLOW H2 275.94 / CH4 14.52 / TOLUENE 0

STREAM 58

SUBSTREAM MIXED TEMP=38.8 PRES=1.013 MOLE-FLOW H2 0 / CH4 0 /
 BENZENE 0 / TOLUENE 281 / & DIPHENYL 0 STREAM 97
 SUBSTREAM MIXED TEMP=38 PRES=1.013 MOLE-FLOW H2 0 / CH4 0 /
 BENZENE 0 / TOLUENE 257 / & DIPHENYL 0

BLOCK B4 MIXER

BLOCK B32 MIXER

BLOCK B34 MIXER

BLOCK B70 MIXER

BLOCK B82 MIXER

BLOCK B27 FSPLIT FRAC 33 0.3031

BLOCK MEMB2 SEP2 PARAM PRES=0 FRAC STREAM=34

SUBSTREAM=MIXED COMPS=CH4 BENZENE TOLUENE &
 DIPHENYL FRACS=1 1 1 1 FRAC STREAM=139 SUBSTREAM=MIXED
 COMPS=H2 FRACS=1

BLOCK B42 HEATER PARAM PRES=32.06 DUTY=0

BLOCK B64 HEATER PARAM TEMP=25 PRES=1.013

BLOCK B76 HEATER PARAM PRES=2.07 DUTY=0

BLOCK B80 HEATER PARAM PRES=1.35 DUTY=0
 BLOCK B103 HEATER PARAM PRES=-40 DUTY=0
 BLOCK COND2 HEATER PARAM TEMP=37.77 PRES=32.06
 BLOCK FOUR2 HEATER PARAM TEMP=621.1 PRES=34.47
 BLOCK FLASHF1 FLASH2 DESCRIPTION "FLASH PRINCIPAL F1"
 PARAM PRES=32.06 DUTY=0
 BLOCK FLASHF2 FLASH2
 PARAM PRES=2.07 DUTY=0
 BLOCK COLBZ3 DSTWU
 PARAM LIGHTKEY=BENZENE RECOVL=0.999 HEAVYKEY=TOLUENE &
 RECOVH=0.0001 PTOP=2.07 PBOT=2.41 RDV=0.003 RR=1.29
 BLOCK COLTOL3 DSTWU
 PARAM LIGHTKEY=TOLUENE RECOVL=0.999 HEAVYKEY=DIPHENYL &
 RECOVH=0.00001 PTOP=1.013 PBOT=1.35 RR=0.041
 BLOCK ABS2 RADFRAC
 PARAM NSTAGE=11 ABSORBER=YES
 FEEDS 38 1 ON-STAGE / 134 11 ON-STAGE / 12 11 &
 ON-STAGE PRODUCTS 40 1 V / 60 11 L
 P-SPEC 1 32.06 COL-SPECS Q1=0 QN=0 MOLE-RDV=1
 BLOCK REACT2 RSTOIC
 DESCRIPTION "REACTEUR AVEC RECYCLAGE DE TOLUENE "
 PARAM PRES=34.47 DUTY=0 SERIES=YES
 STOIC 1 MIXED TOLUENE -1 / H2 -1 / BENZENE 1 / CH4 1
 STOIC 2 MIXED BENZENE -1 / H2 0.5 / DIPHENYL 0.5
 CONV 1 MIXED TOLUENE 0.75
 CONV 2 MIXED BENZENE 0.031
 BLOCK B2 PUMP PARAM PRES=37.92 EFF=0.95
 BLOCK B48 PUMP PARAM PRES=32.06 EFF=0.95
 BLOCK B33 COMPR PARAM TYPE=GPSA-POLYTROP
 PRES=37.92 MEFF=0.95
 BLOCK B46 COMPR PARAM TYPE=GPSA-POLYTROP
 PRES=41.013 MEFF=0.95
 BLOCK B106 MCOMPR PARAM NSTAGE=2 TYPE=GPSA-POLYTROPIC
 PRES=32.06 FEEDS 78 1 PRODUCTS 134 2
 COMPR-SPECS 1 MEFF=0.95 / 2 MEFF=0.95
 COOLER-SPECS 1 TEMP=120 / 2 TEMP=120
 BLOCK MCOMP2 MCOMPR
 PARAM NSTAGE=2 TYPE=GPSA-POLYTROPIC PRES=32.06
 FEEDS 35 1 PRODUCTS 69 2
 COMPR-SPECS 1 MEFF=0.95 / 2 MEFF=0.95
 COOLER-SPECS 1 TEMP=49 / 2 TEMP=49

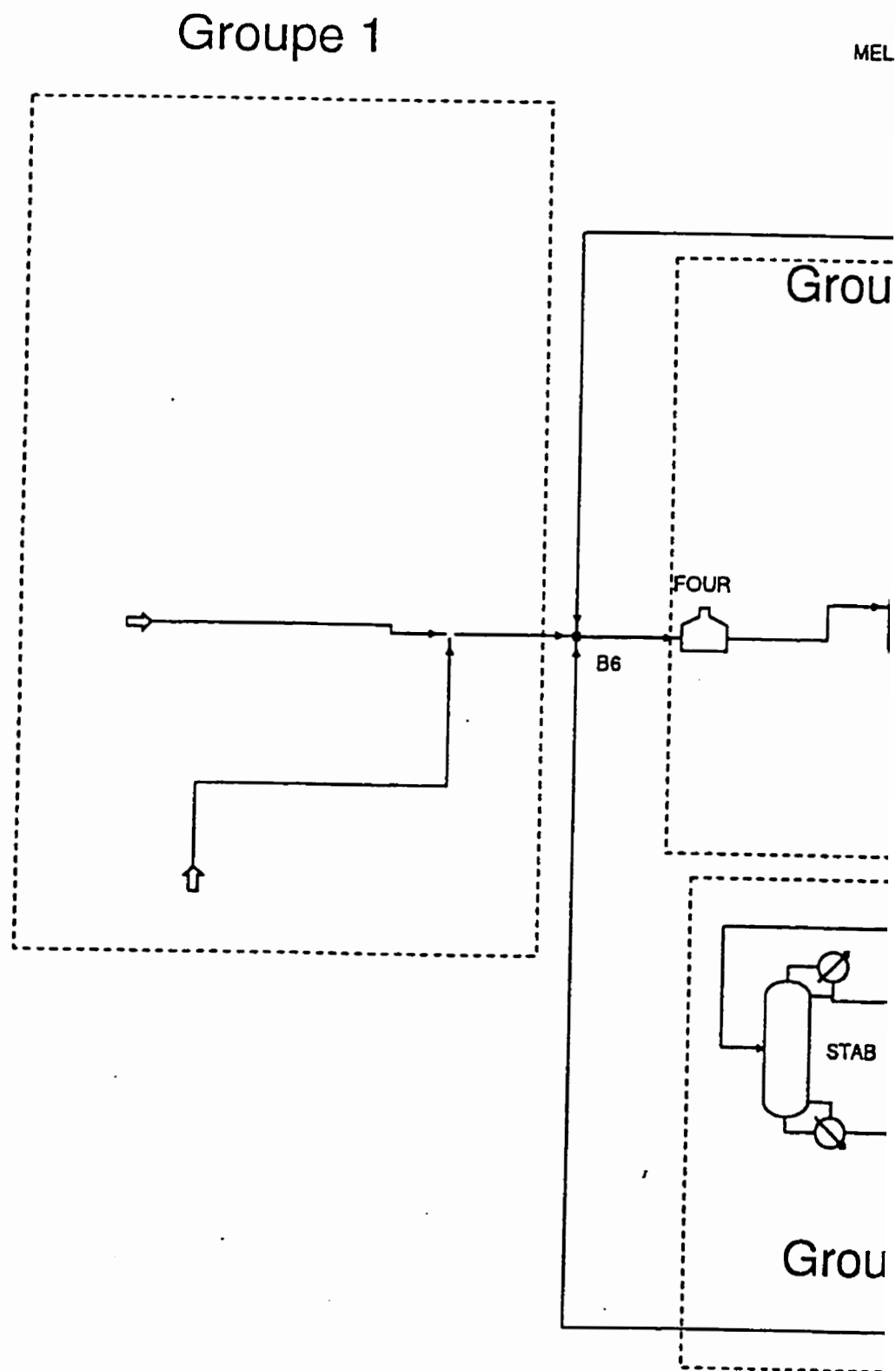
```

DESIGN-SPEC H2SAR  DEFINE H2 MOLE-FLOW STREAM=6
  SUBSTREAM=MIXED COMPONENT=H2  DEFINE TOL MOLE-FLOW
STREAM=6 SUBSTREAM=MIXED &
  COMPONENT=TOLUENE  DEFINE BENZ MOLE-FLOW STREAM=6
  SUBSTREAM=MIXED &  COMPONENT=BENZENE
  DEFINE DIPH MOLE-FLOW STREAM=6 SUBSTREAM=MIXED &
  COMPONENT=DIPHENYL  SPEC "H2/(TOL+BENZ+DIPH)" TO "5"
  TOL-SPEC "1"
  VARY MOLE-FLOW STREAM=43
  SUBSTREAM=MIXED COMPONENT=H2
  LIMITS "260" "350" DESIGN-SPEC PB
  DEFINE PB MOLE-FLOW STREAM=83 SUBSTREAM=MIXED &
  COMPONENT=BENZENE  SPEC "PB" TO "265"  TOL-SPEC "0.05"
  VARY MOLE-FLOW STREAM=97 SUBSTREAM=MIXED
  COMPONENT=TOLUENE  LIMITS "240" "300"

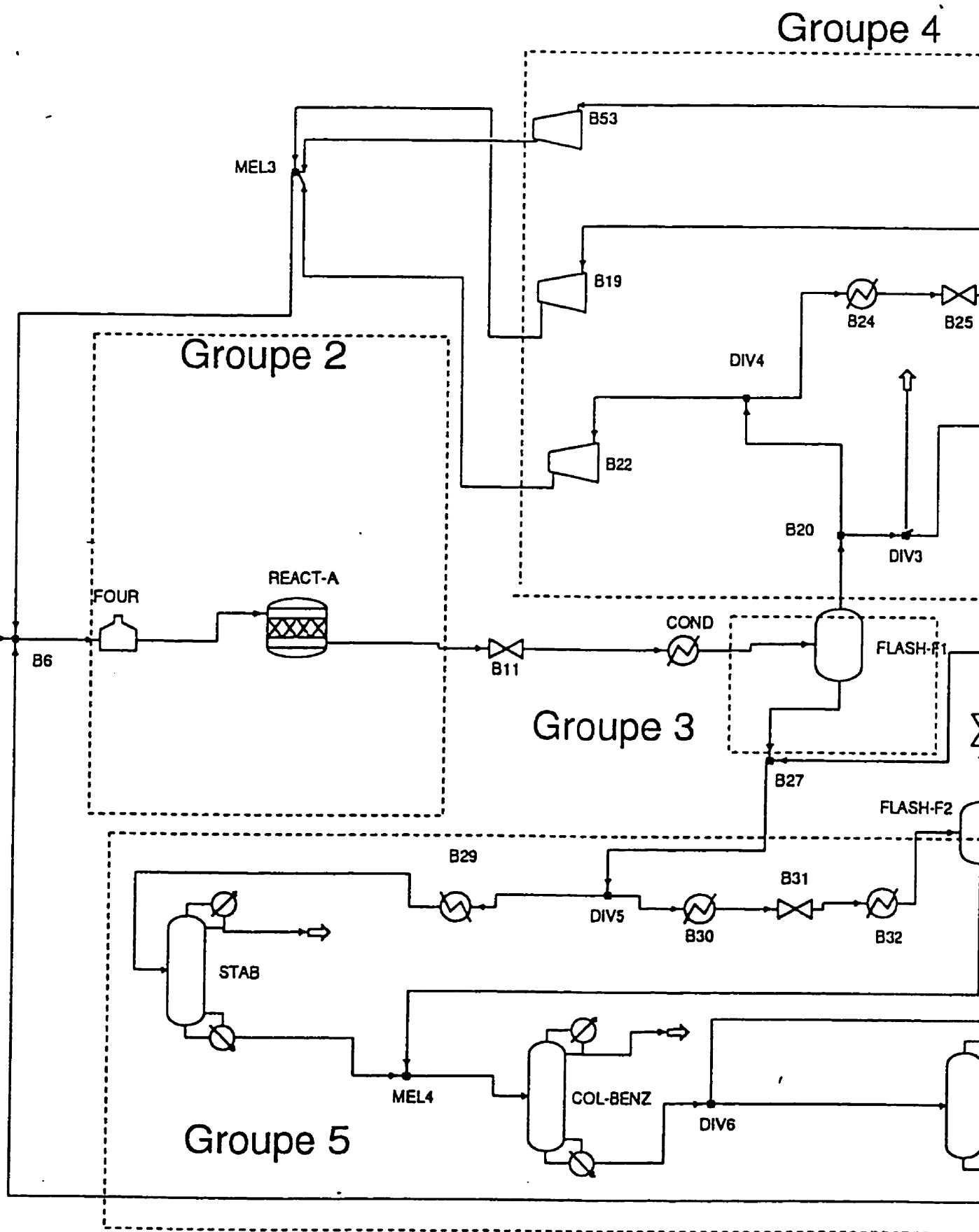
STREAM-REPOR MOLEFLOW MOLEFRAC PROPERTIES=PS-1 PS-2 PS-3 ;;;;

```

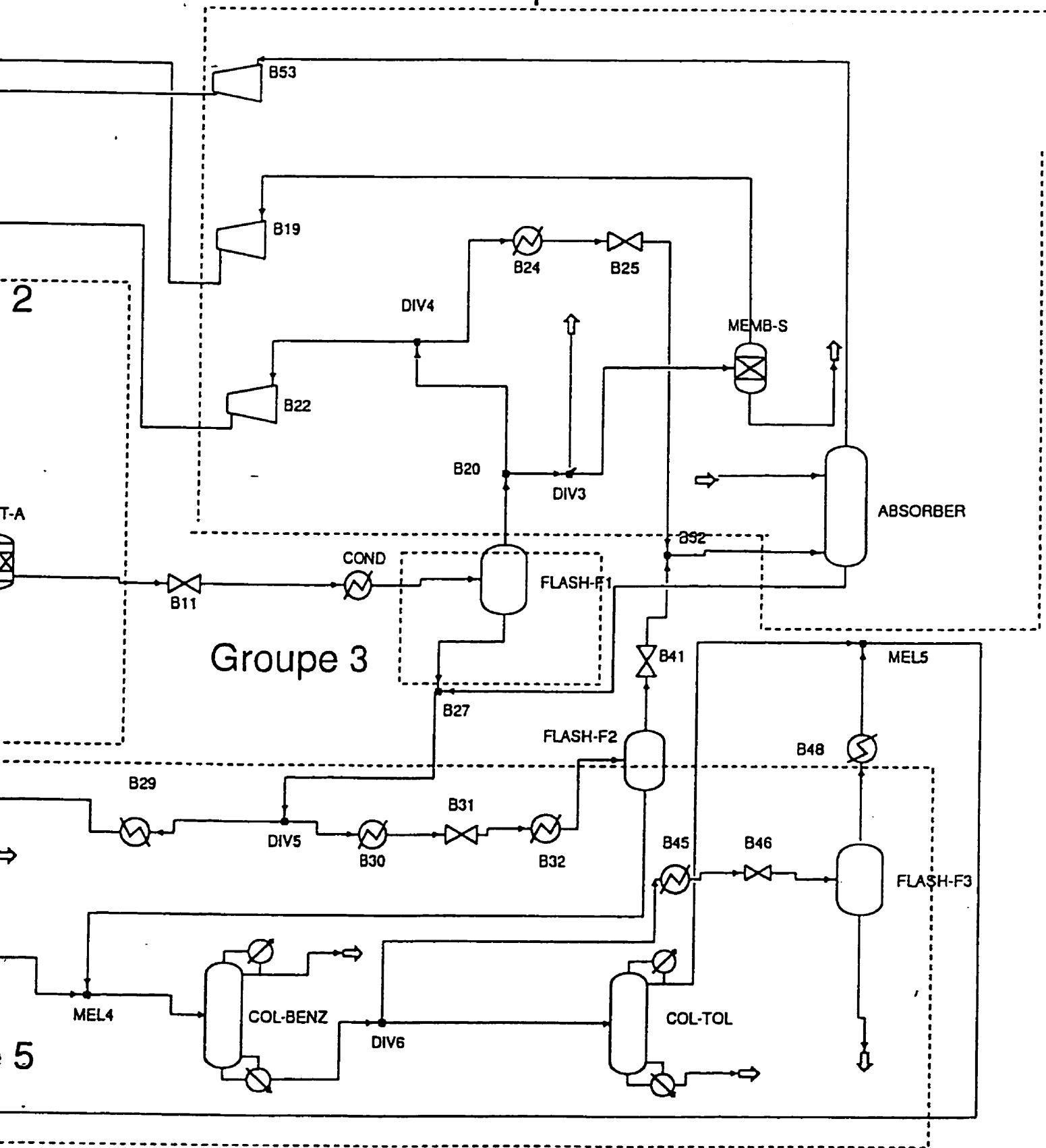
PLAN 1 : SCHÉMA D'ÉCOULEMENT DE LA SUPERSTRUCTURE DE BASE



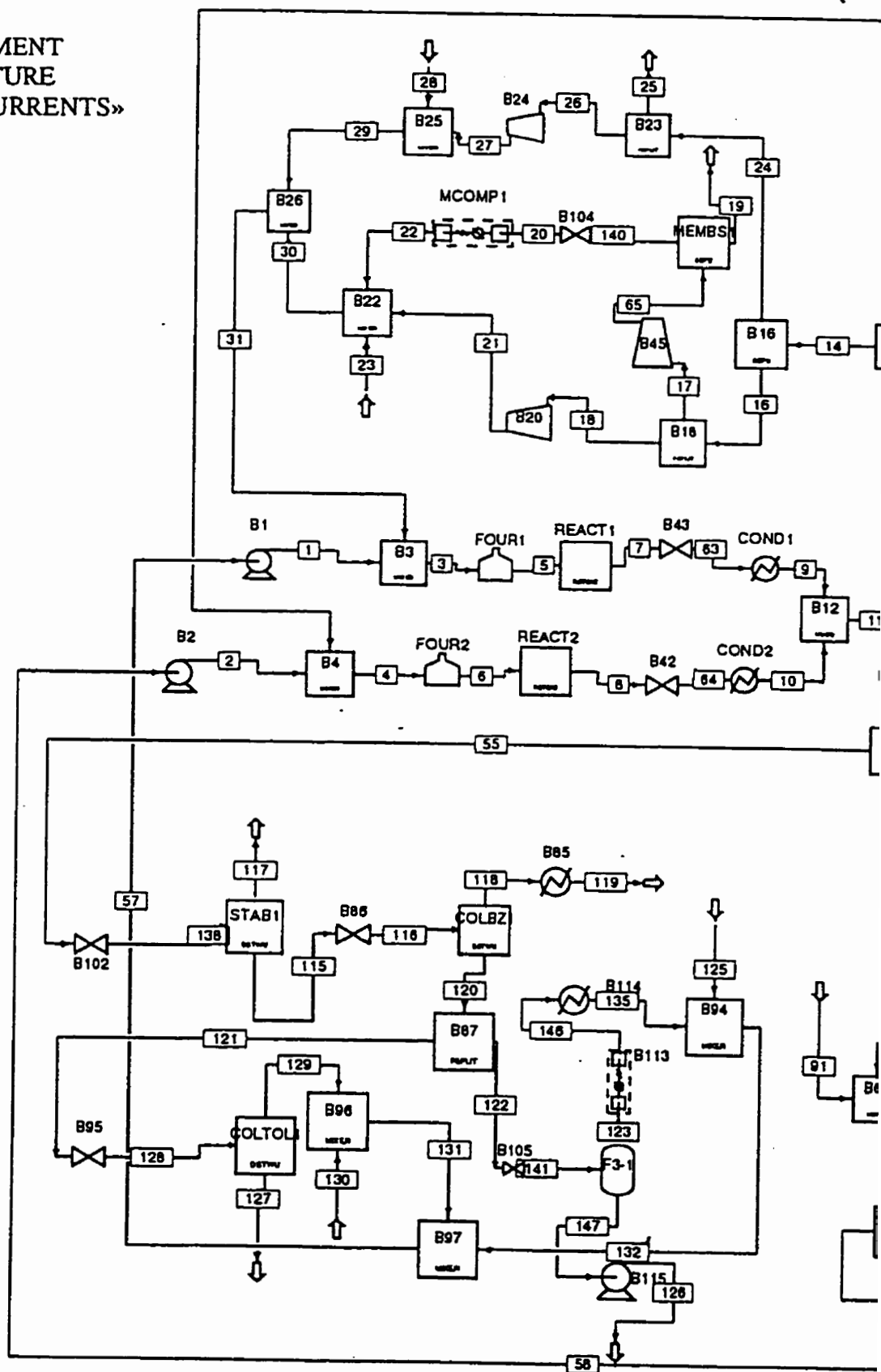
1

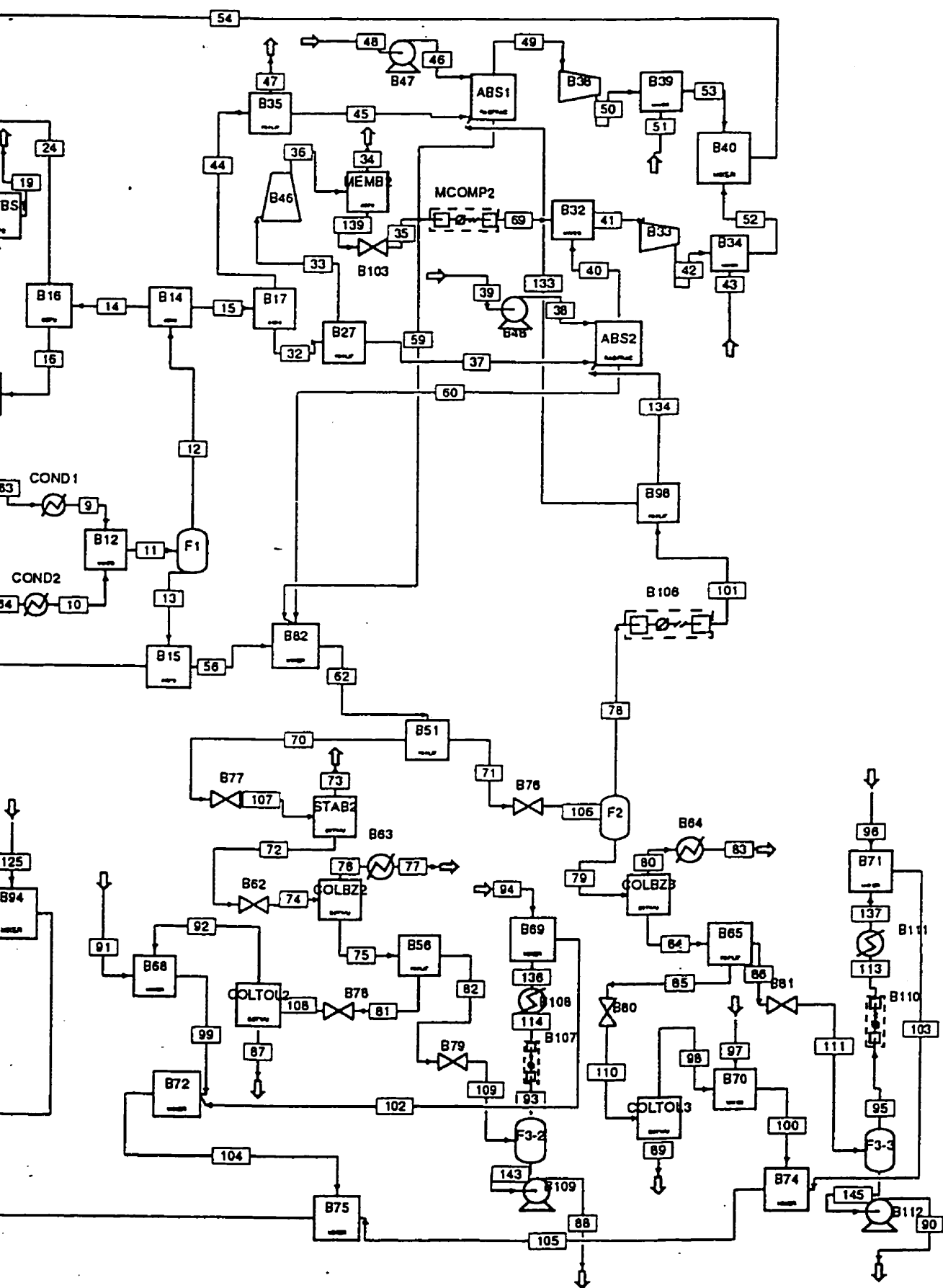


Groupe 4

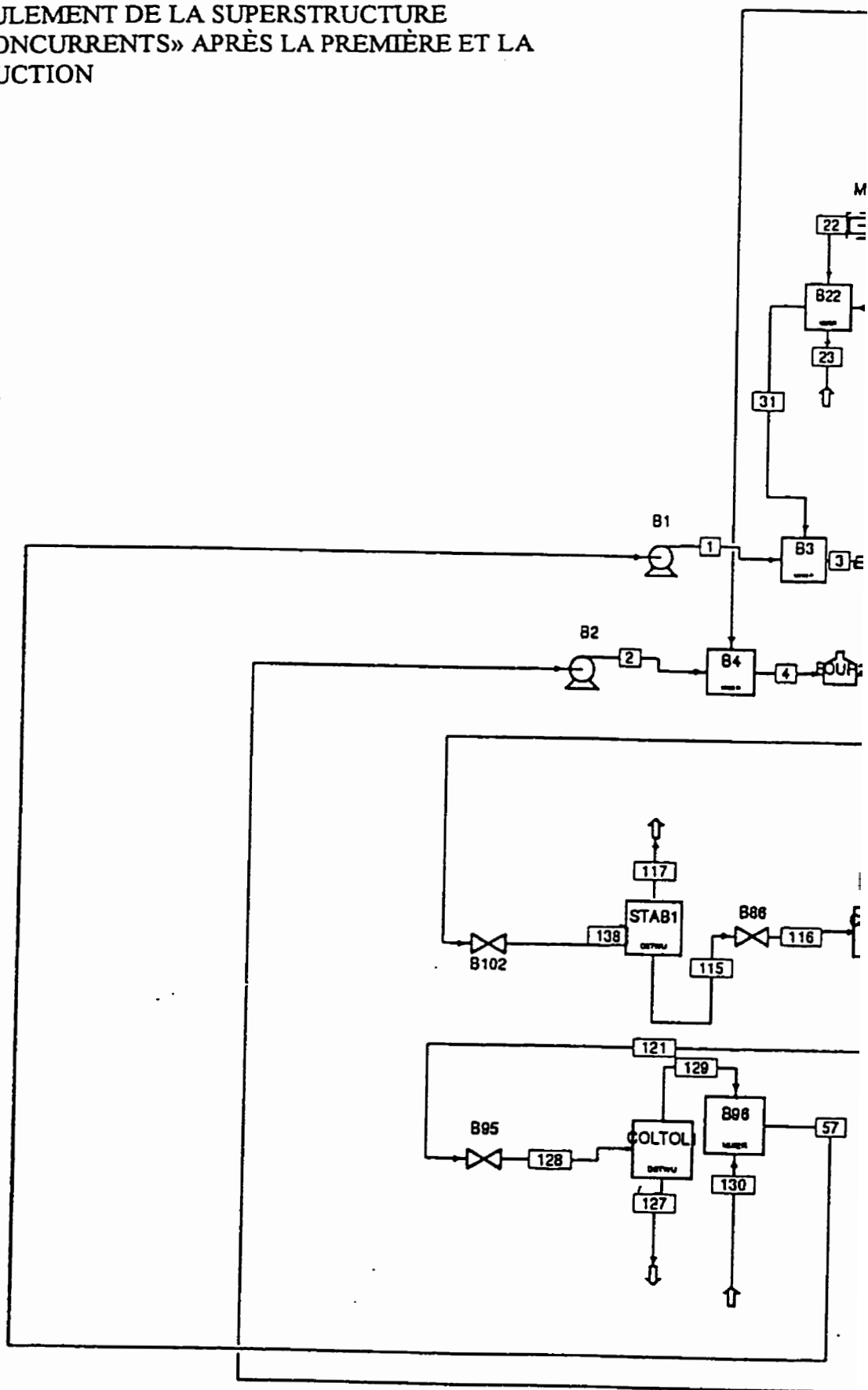


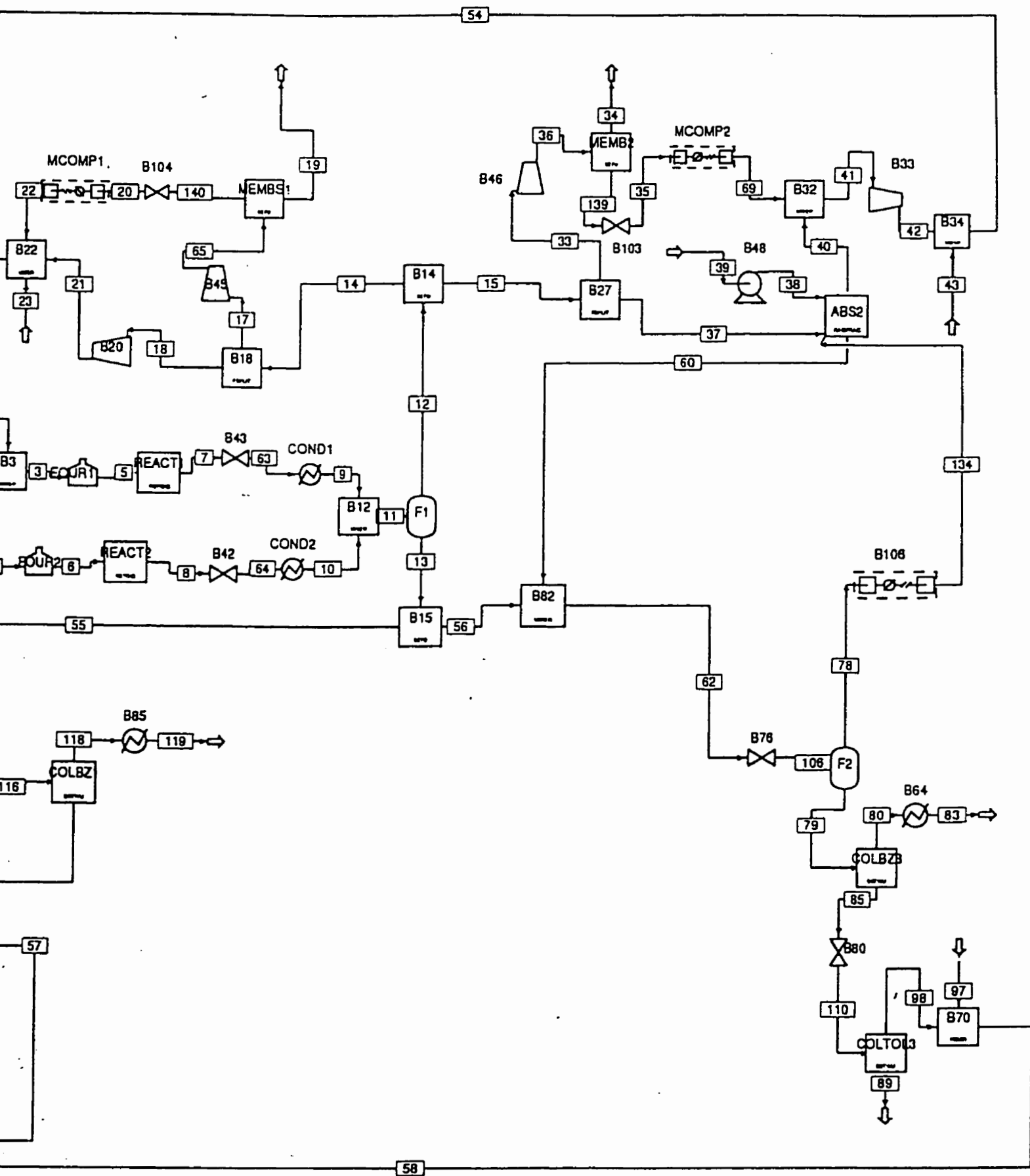
PLAN 2 : SCHÉMA D'ÉCOULEMENT
DE LA SUPERSTRUCTURE
À «PROCÉDÉS CONCURRENTS»



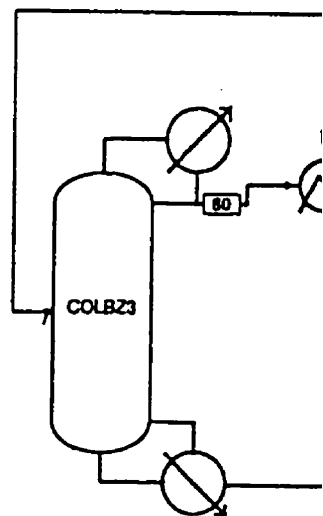
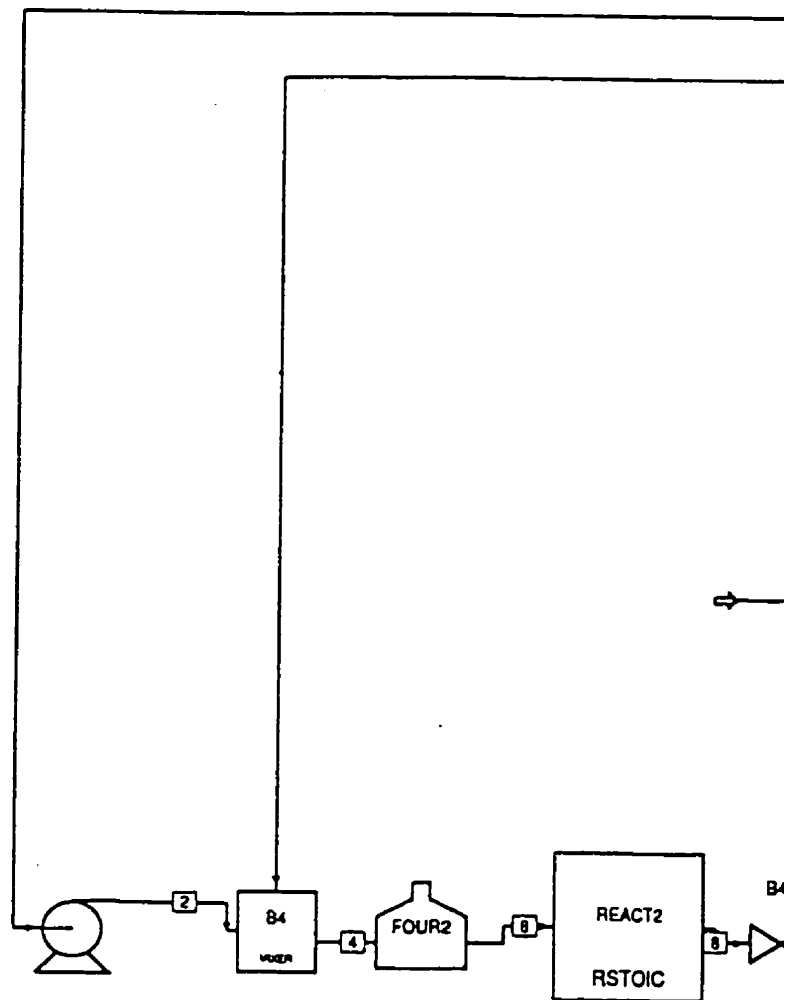


PLAN 3 : SCHÉMA D'ÉCOULEMENT DE LA SUPERSTRUCTURE
À «PROCÉDÉS CONCURRENTS» APRÈS LA PREMIÈRE ET LA
DEUXIÈME RÉDUCTION





PLAN 4 : SCHÉMA D'ÉCOULEMENT DE LA SOLUTION FINALE



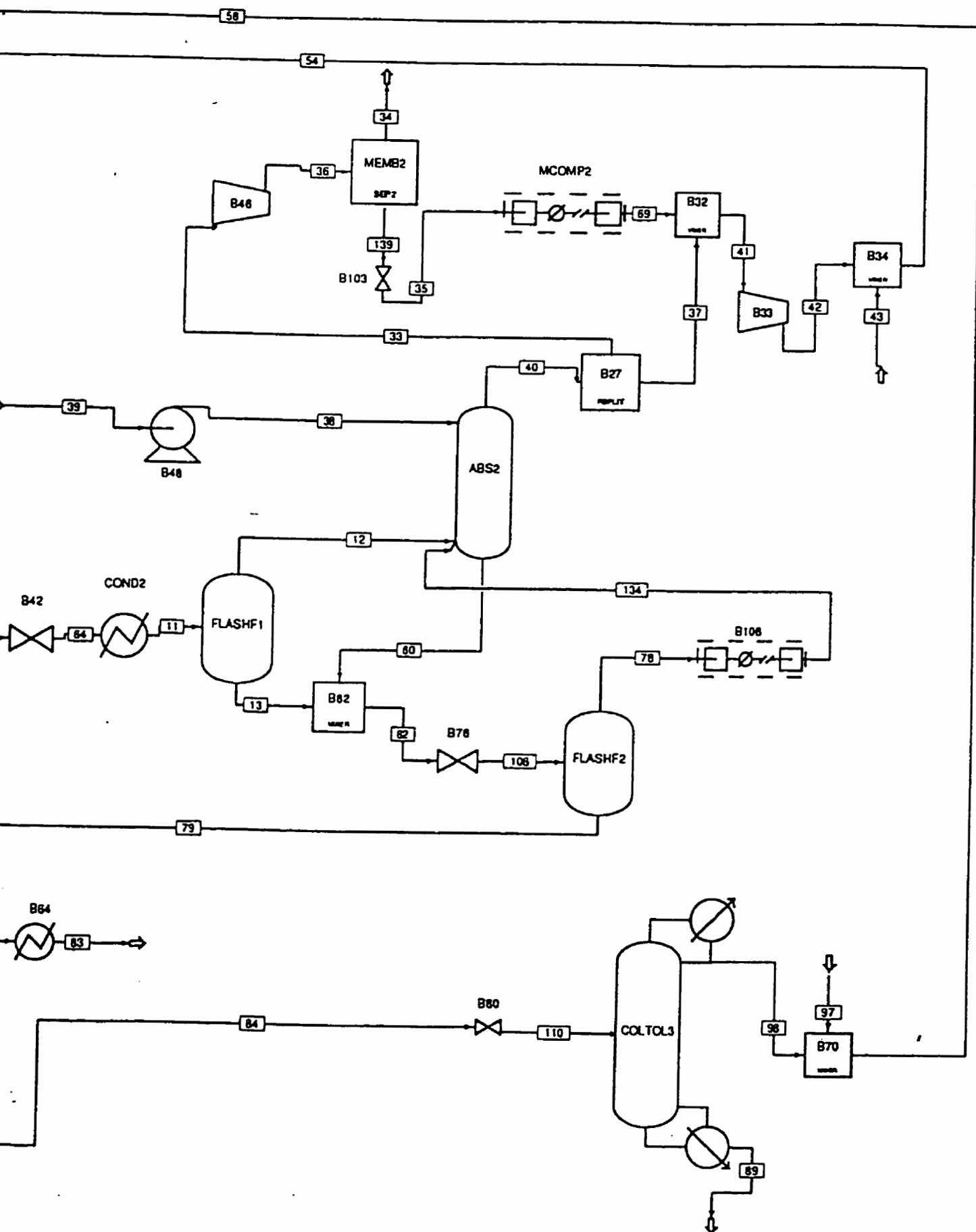
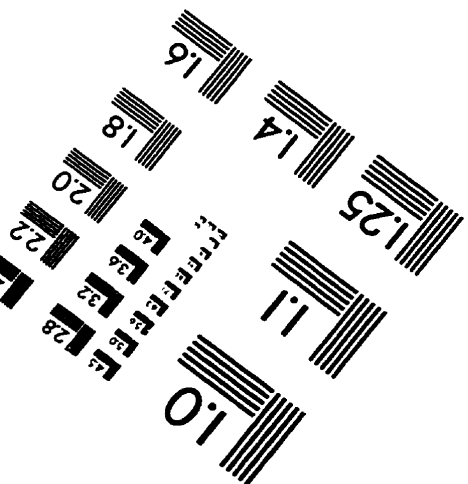
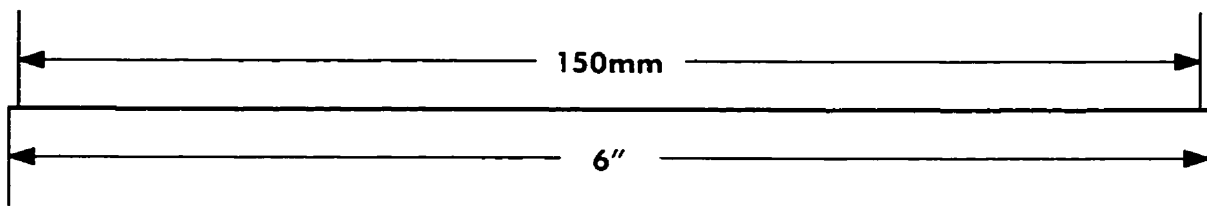
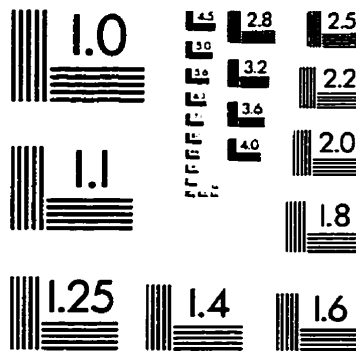
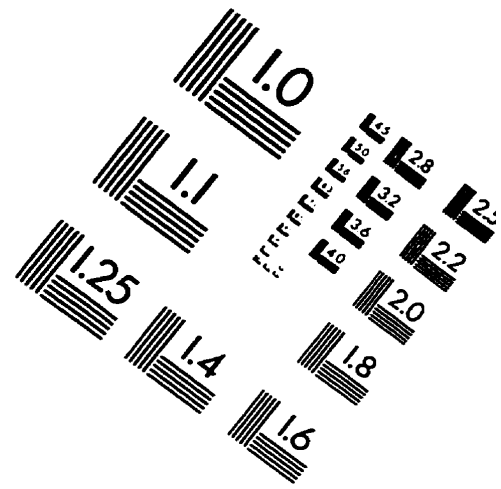
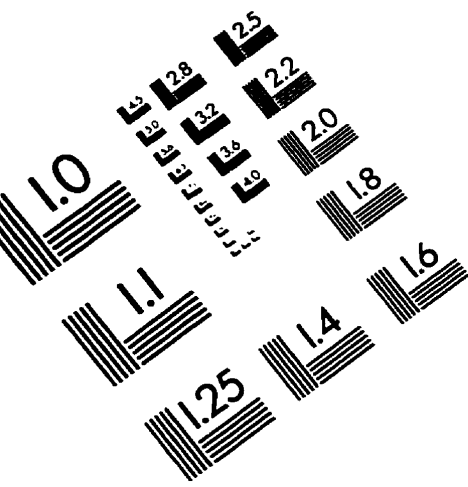


IMAGE EVALUATION TEST TARGET (QA-3)



APPLIED IMAGE, Inc
1653 East Main Street
Rochester, NY 14609 USA
Phone: 716/482-0300
Fax: 716/288-5989

© 1993, Applied Image, Inc., All Rights Reserved

